Module structure atomique

1. Modèle quantique de l'atome
2. Tableau périodique
3. La liaison chimique
4. Nomenclature et géométrie des composés organiques

Préparation des TD :

https://moodle.iut-acy.univ-savoie.fr/login/index.php

Révisions : tests 09-10 & 10-11 (V:\DUT\MPH\Doc-Etudiants\MPh1\MPH1 Strat\Test Années précédentes ou sur moodle)

Bibliographie (1)

Partie 1 : Modèle quantique de l'atome

- Livres de classes préparatoires PCSI 2ème période

Ex : . Chimie PCSI, S. Devillard, Ellipses
. Chimie PCSI, P. Grécias & V. Tejedor, Tec & Doc
. H-Prépa Chimie 2, A. Durupthy, Hachette

- Chimie Générale, Kotz, JR. Treichel, De Boeck
- Chimie Générale, S.S. Zumdhal & coll., De Boeck université
- La structure électronique des molécules 1, Y. Jean & F. Volatron, Dunod
- La chimie en IUT et BTS, F. Vassaux, Ellipses
- Site de l'université de Sheffield : http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/
- Logiciel Schrödinger, H.-P. Steinrück & coll., Université de Würzburg

Partie 2 : Tableau périodique

- Livres de classes préparatoires PCSI 1ère période

Ex : . Chimie PCSI, S. Devillard, Ellipses
. Chimie PCSI, P. Grécias & V. Tejedor, Tec & Doc
. H-Prépa Chimie 2, A. Durupthy, Hachette

- Chimie inorganique cours 2ème cycle, A. Casalot & A. Durupthy, Hachette
- Cours de Chimie Physique, P. Arnaud, Dunod
- Site : http://www.webelements.com/

Bibliographie (2)

Partie 3 : La liaison chimique

- Livres de classes préparatoires PCSI 1ère période

Ex : . Chimie PCSI, S. Devillard, Ellipses
. Chimie PCSI, P. Grécias & V. Tejedor, Tec & Doc
. H-Prépa Chimie 2, A. Durupthy, Hachette

- Chimie Générale, S.S. Zumdhal & coll., De Boeck université
- La structure électronique des molécules 1, Y. Jean & F. Volatron, Dunod
- Site de l'université de Sheffield : http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/

Partie 4 : Nomenclature et géométrie des composés organiques

- Livre de Chimie TermS
- Livres de classes préparatoires PCSI 1ère période

Ex : . Chimie PCSI, S. Devillard, Ellipses
. Chimie PCSI, P. Grécias & V. Tejedor, Tec & Doc
. H-Prépa Chimie 2, A. Durupthy, Hachette

- Sites développant l'analyse conformationnelle et la stéréo-isomérie :
http://www.faidherbe.org/site/cours/dupuis/conform.htm
http://www.faidherbe.org/site/cours/dupuis/regcip.htm
http://wetche.cmbi.ru.nl//organic/nalkanesconf/butane/jmindex.html

Pour aller plus loin en chimie organique :

- Traité de chimie organique, K.P.C. Vollhardt & coll, De Boeck
- Introduction à la chimie organique, J. Drouin, Librairie du Cèdre

Chapitre 1

Structure de la matière et modèle quantique

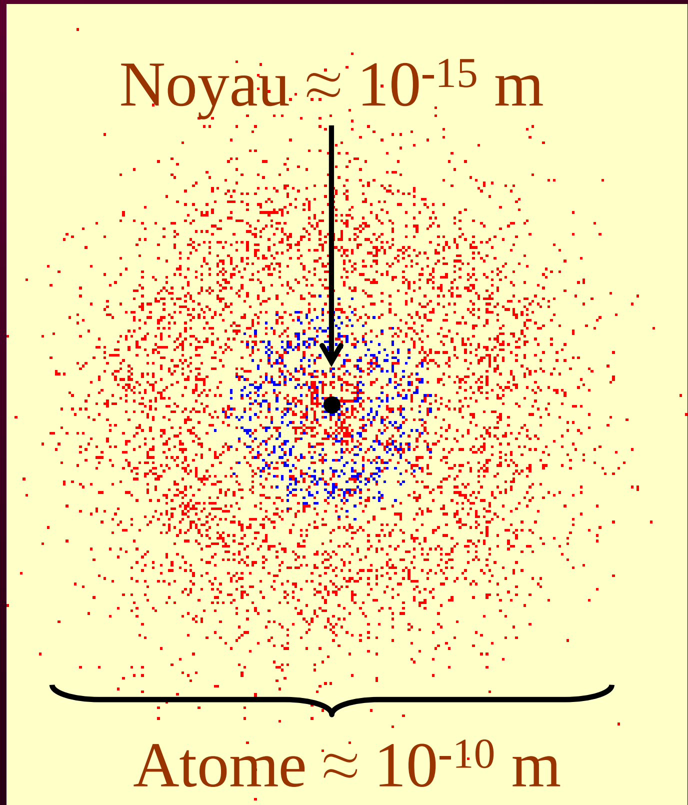


Figure 1-1 : Coupe transversale d'un atome
(http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/)

I. Structure de l'atome (Rappel TS)

I.1. La composition du noyau

$$^{A}_{Z}X$$

A : nombre de nucléons

Z : nombre de charges = numéro atomique

N = A – Z : nombre de neutrons

	Proton	*Neutron*	*électron*
Masse	$1,67.10^{-27}$ kg	$1,67.10^{-27}$ kg	$9,11.10^{-31}$ kg
Charge	+e	0	-e

Exemples : H ; O ; U

➪ IONS : excès d'électrons : ANION (charge négative)
défaut d'électrons : CATION (charge positive)

I.2. L'élément chimique et l'isotopie

Elément : ensemble d'atomes ou ions ayant même numéro atomique Z.

Isotopes : ensemble des noyaux différents d'un même élément (A ≠ ; Z =).

Abondance naturelle : pourcentage en masse de chacun des isotopes dans le mélange naturel d'un élément.

Exemples : H ; O ; Cl

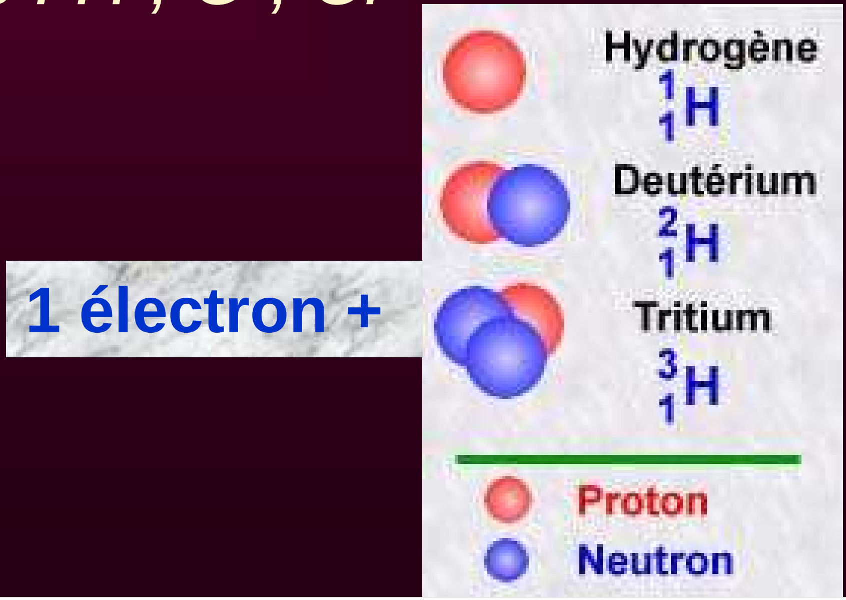


Figure 1-2 : Isotopes de l'élément hydrogène

II. Organisation de la matière (Rappel TS)

II.1. La molécule

Molécule : Assemblage d’atomes liés par des liaisons covalentes résultant de la mise en commun d’électrons.

Exemples : H_2O, CH_4, NH_4^+

II.2. Corps simples

Corps simple : corps constitué d’un seul élément.

Exemples : H_2, O_2, carbone, fer

II.3. Corps composés

Corps composé : corps constitué de plusieurs éléments.

Exemples : H_2O, Fe_2O_3, calcaire

II.4. Grandeurs à l'échelle du chimiste

La mole : Quantité de matière contenant autant de particules qu'il y en a dans 12g de carbone 12.

$$\mathcal{N} = 6{,}02.10^{23} \text{ particules}$$

La masse molaire M (g.mol^{-1}) : masse d'une mole de particules.

Exemple : Cl

$$n = \frac{m}{M}$$

Le faraday : quantité d'électricité contenu dans une mole d'électrons.

$$1 \text{ F} = 1{,}6.10^{-19} \times 6{,}02.10^{23} = 96\,500 \text{ C}$$

III. Modèle quantique de l'atome H

III.1. L'onde électromagnétique

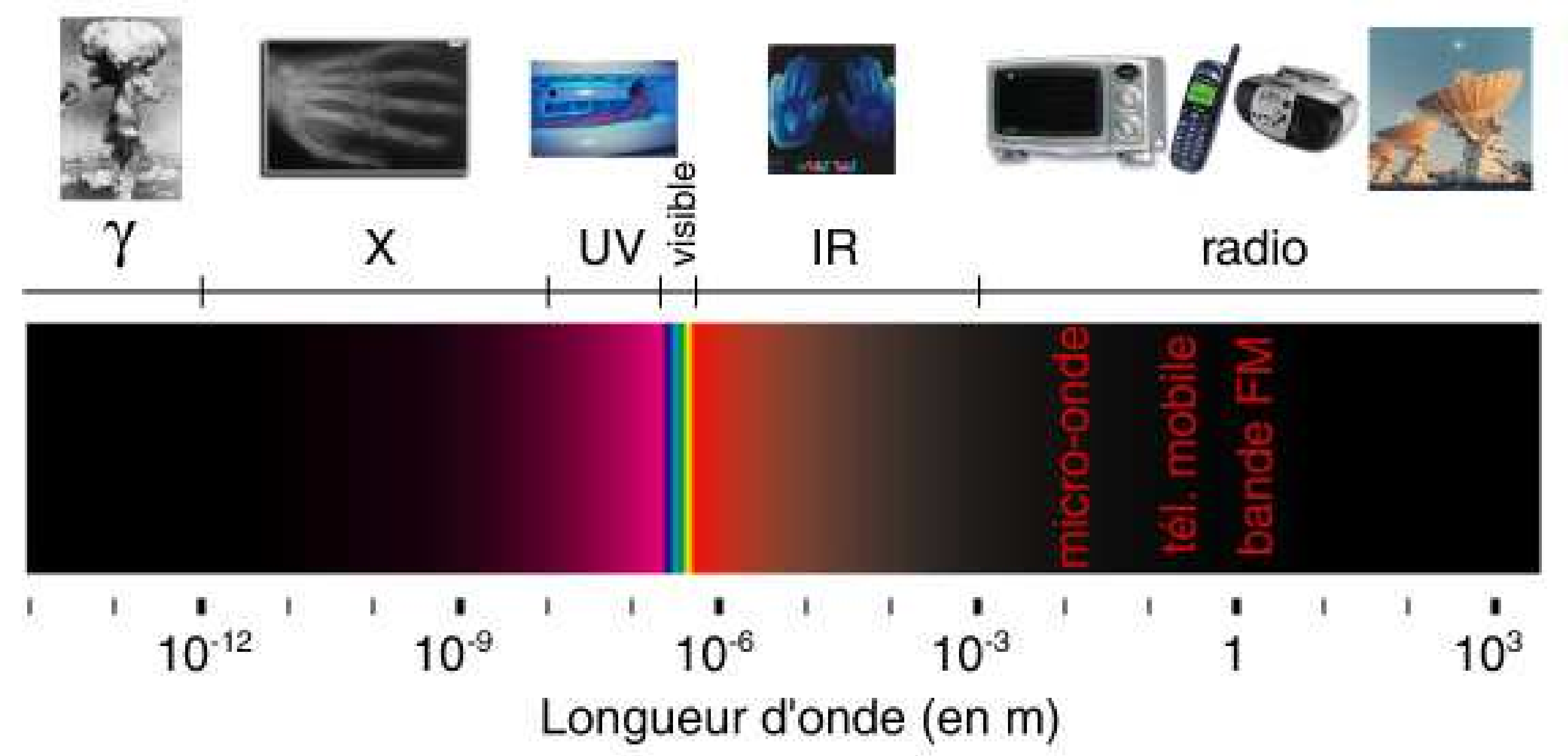
comportement ondulatoire : λ (m) : longueur d'onde

ν (Hz ou s^{-1}) : fréquence

$$\lambda\nu = c$$

Figure 1-3 : Spectre électromagnétique

(http://fr.wikipedia.org/wiki/Spectre_%C3%A9lectromagn%C3%A9tique)



III.2. Nature de la lumière

Début XXème : l'approche purement ondulatoire est mise en défaut

1. Quantification de l'énergie (Max Planck, 1900) : les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement se font en absorbant ou en émettant des quantités d'énergie nε avec

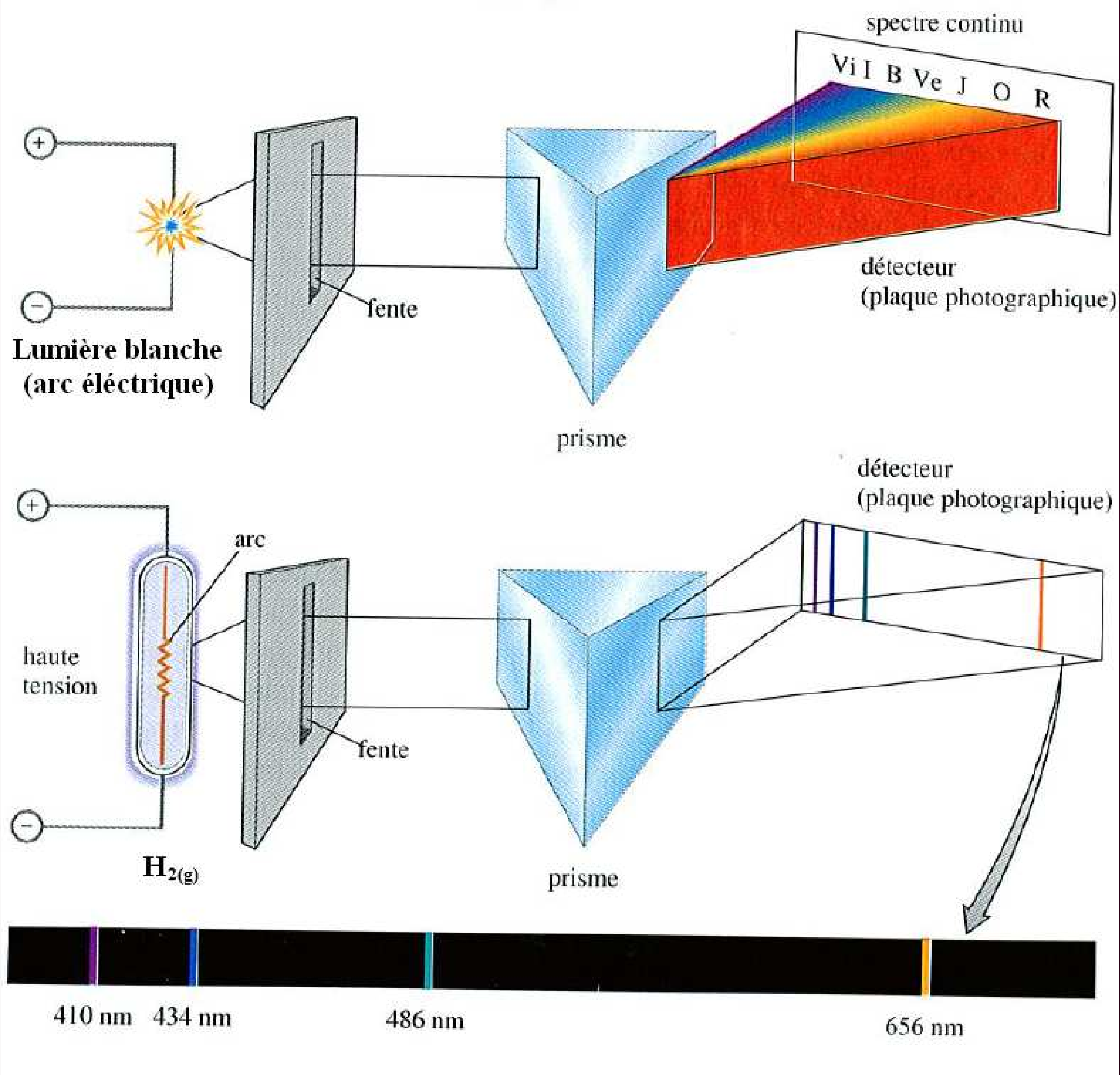
$$\varepsilon = h\nu = hc/\lambda$$

(h = constante de Planck = $6{,}63.10^{-34}$ J.s)

2. Einstein (1905) établit la relation $E = mc^2$ qui relie une masse à une longueur d'onde.

Nature duale de la lumière : corpusculaire et ondulatoire

III.3. Spectre de l'atome d'hydrogène



spectre continu de la lumière blanche

spectre de raies de H_2

Figure 1-4 : Spectre continu et spectre de raies (Chimie Générale, S.S. Zumdhal & coll., De Boeck université)

Excitation : - par décharge électrique
- par absorption d'un rayonnement électromagnétique
- par choc thermique (collision)

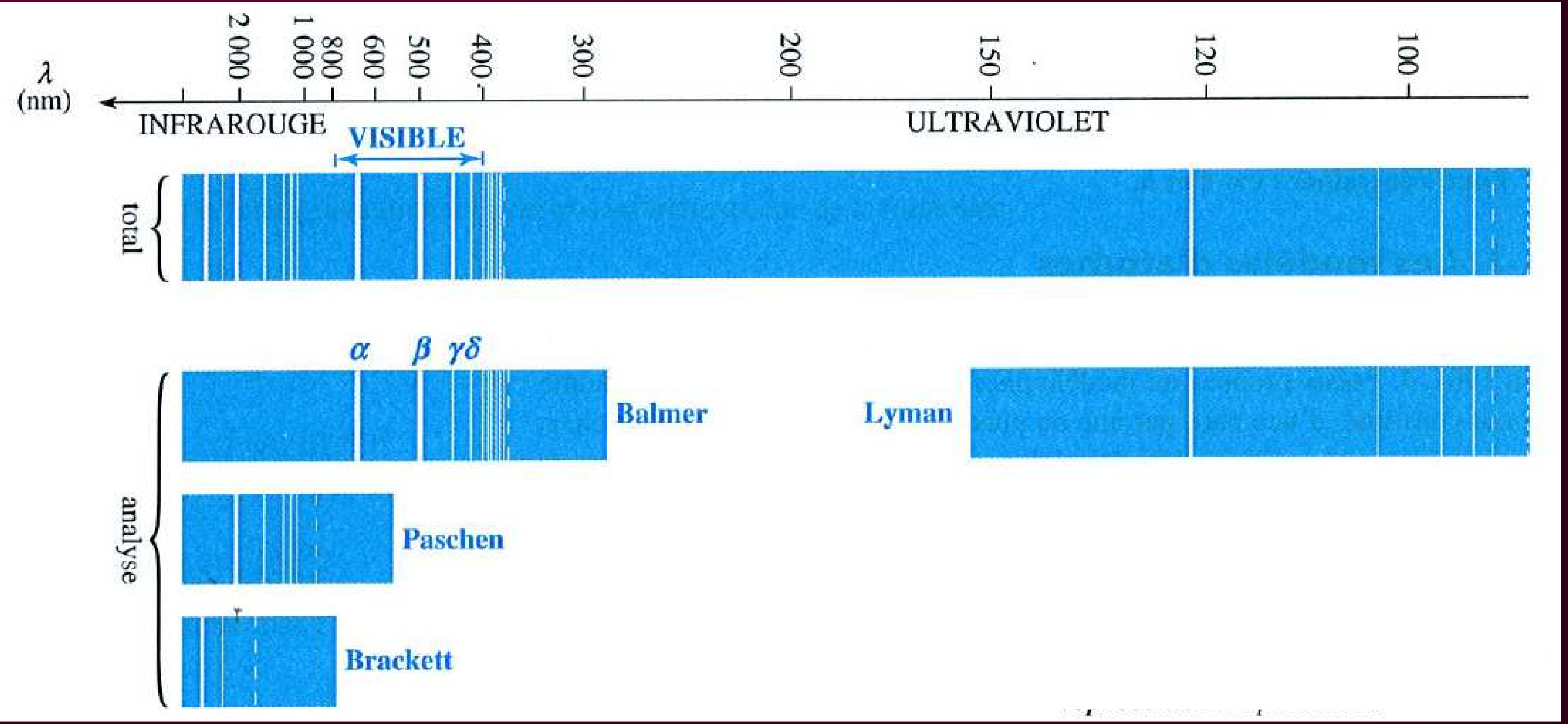


Figure 1-5 : Spectre de H au voisinage du visible
(H-Prépa Chimie 2, A. Durupthy, Hachette)

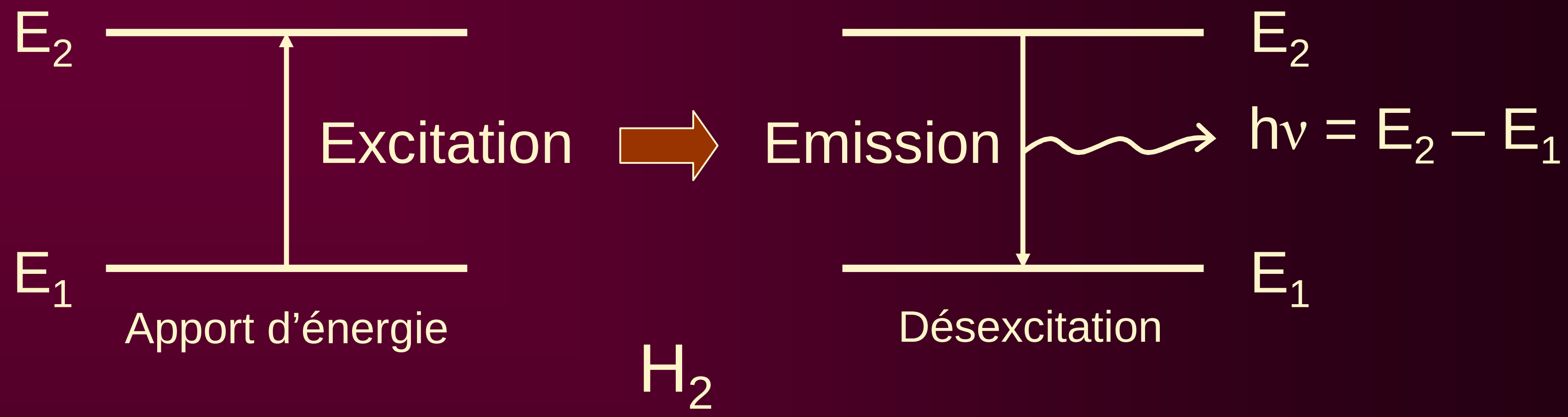
Formule de Rydberg et Ritz

$$\frac{1}{\lambda_{p,n}} = R_H\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right)$$

avec p > n (n et p Є N*)

R_H = constante de Rydberg
= 10979708,014 m^{-1}

III.4. Interprétation



Les atomes (et les molécules) ne peuvent prendre que certains états et leur énergie est quantifiée par 2 nombres entiers (n, l) telle que

$$\mathbf{E(n, \ell) = - f(\ell) / n^2}$$

n : nombre quantique principal ($n > 0$)

ℓ : nombre quantique secondaire ou azimutal ($0 \leq \ell \leq n - 1$)

Cas de H : E_n (eV) = $-13{,}6 / n^2$

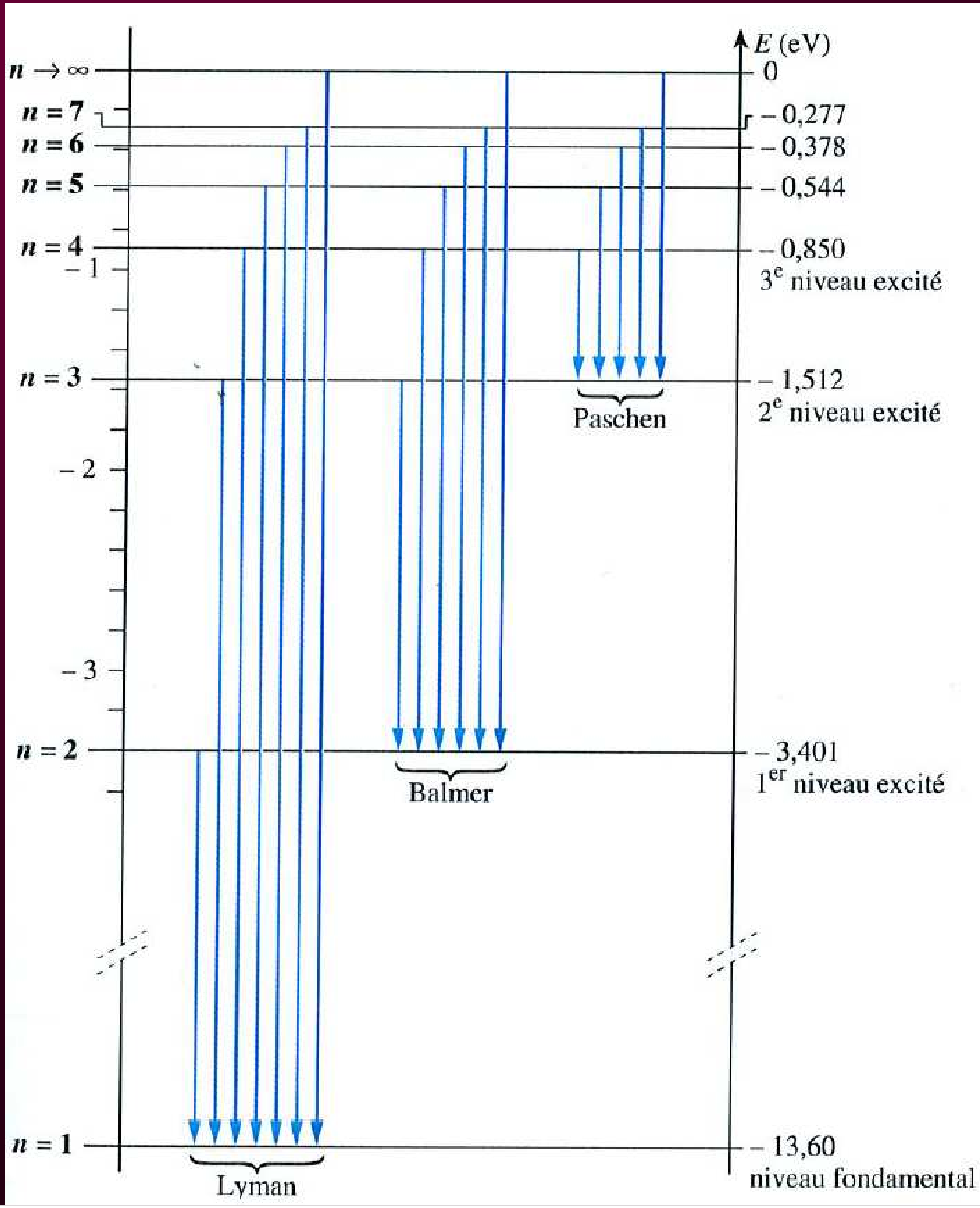


Figure 1-6 : Spectre d'émission de H (diagramme énergétique)

(H-Prépa Chimie 2, A. Durupthy, Hachette)

III.5. Energie d'ionisation

Energie d'ionisation : énergie à fournir pour arracher un électron à un atome, c'est-à-dire envoyer cet électron sur le niveau d'énergie E = 0 eV ($E_i > 0$).

IV. Les orbitales atomiques

IV.1. Une nouvelle mécanique élaborée dans les années 1920 : la mécanique quantique

	Mécanique classique	*Mécanique quantique*
Equation fondamentale	$m\vec{a} = \sum \vec{F}_{ext}$	Equation de Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$
Variables	$\vec{v}$	Ψ(x,y,z,t) : fonction d'onde
	(x,y,z,t)	Ψ^2(x,y,z,t) : densité de probabilité de présence

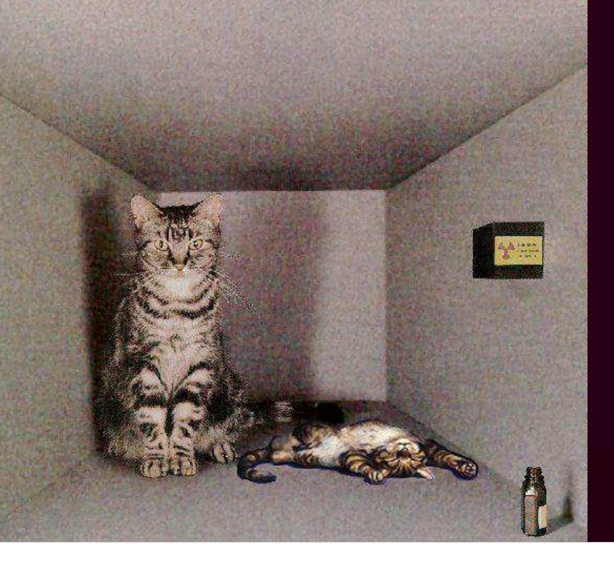
Energie totale$_{\text{électron}}$ = E_c + E_{pot}

$$= \frac{-h}{8\pi m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right)+V$$

Principe d'incertitude d'Heisenberg : $\Delta x.\Delta(mv) \geq h / 2\pi$

Exemple : la balle de tennis, l'électron

Modélisation macroscopique : le chat de Schrödinger



IV.2. Nombres quantiques

n : nombre principal (n > 0)

l : nombre quantique secondaire ($0 \leq \ell \leq n-1$)

m_l : nombre quantique magnétique ($-\ell \leq m_\ell \leq \ell$)

- Les orbitales atomiques (OA) sont fonction de n, ℓ et m_ℓ.
- Les OA de même n et ℓ ont même énergie
  pour $\ell = 1$: 3 OA dégénérées
  pour $\ell = 2$: 5 OA dégénérées

n	Couche	ℓ $(0 \leq \ell \leq n-1)$	Sous-couche	m_ℓ $(-\ell \leq m_\ell \leq \ell)$	Nom de l'OA	Nombre maximal d'électrons
1	K	0	s	0	1s	2
2	L	0	s	0	2s	2 + 6
		1	p	{–1 ; 0 ; 1}	$\{2p_x ; 2p_y ; 2p_z\}$	
3	M	0	s	0	3s	2 + 6 + 10
		1	p	{–1 ; 0 ; 1}	$\{3p_x ; 3p_y ; 3p_z\}$	
		2	d	{–2 ; –1 ; 0 ; 1 ; 2}	$\{3d_{xy} ; 3d_{xz} ; 3d_{yz} ; 3d_{z2} ; 3d_{x2-y2}\}$	
4	N	0	s	0	4s	2 + 6 + 10 + 14
		1	p	{–1 ; 0 ; 1}	$\{4p_x ; 4p_y ; 4p_z\}$	
		2	d	{–2 ; –1 ; 0 ; 1 ; 2}	$\{4d_{xy} ; 4d_{xz} ; 4d_{yz} ; 4d_{z2} ; 4d_{x2-y2}\}$	
		3	f	{–3 ; –2 ; –1 ; 0 ; 1 ; 2 ; 3}	7 orbitales	

Figure 1-7 : Récapitulatif de la nomenclature des orbitales atomiques

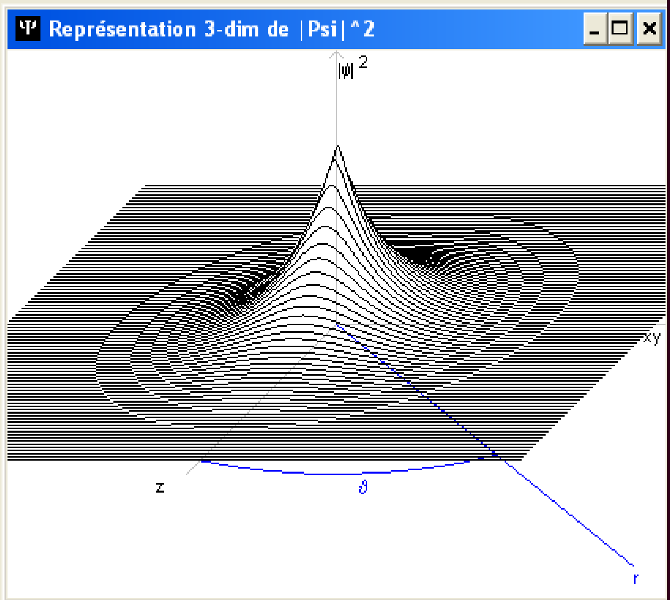
IV.3. Formes des OA

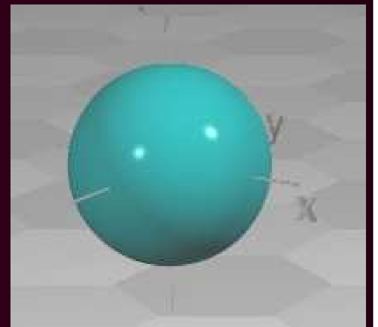
(http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/ et Logiciel Schrödinger, H.-P. Steinrück & coll., Université de Würzburg)

OA s

Psi: Fonction d'onde

$$\psi_{1,0,0} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} \exp\left(-r/r_0\right)$$

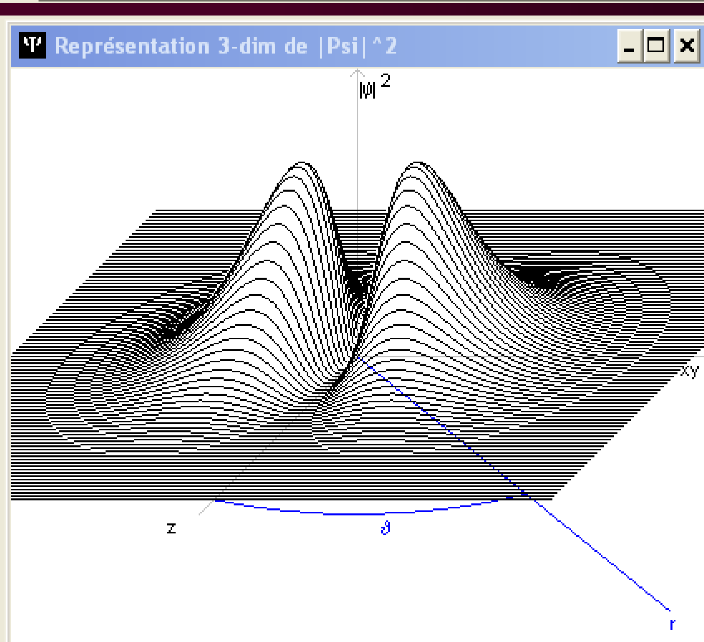


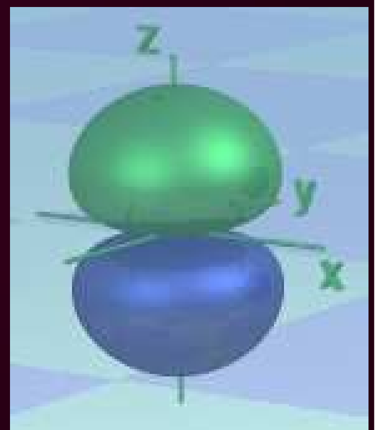


OA p

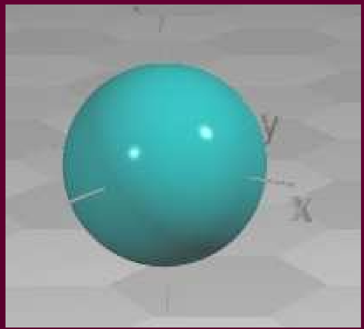
Psi: Fonction d'onde

$$\psi_{2,1,1} = \frac{1}{16\sqrt{2\pi r_0^5}} \sin\vartheta \cdot r \cdot \exp\left(-r/2r_0\right) \cdot e^{i\varphi}$$

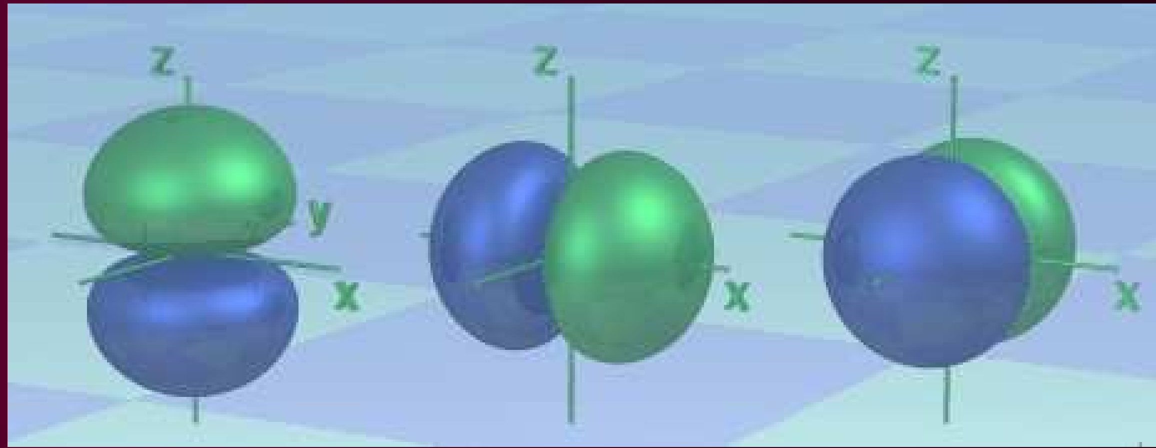




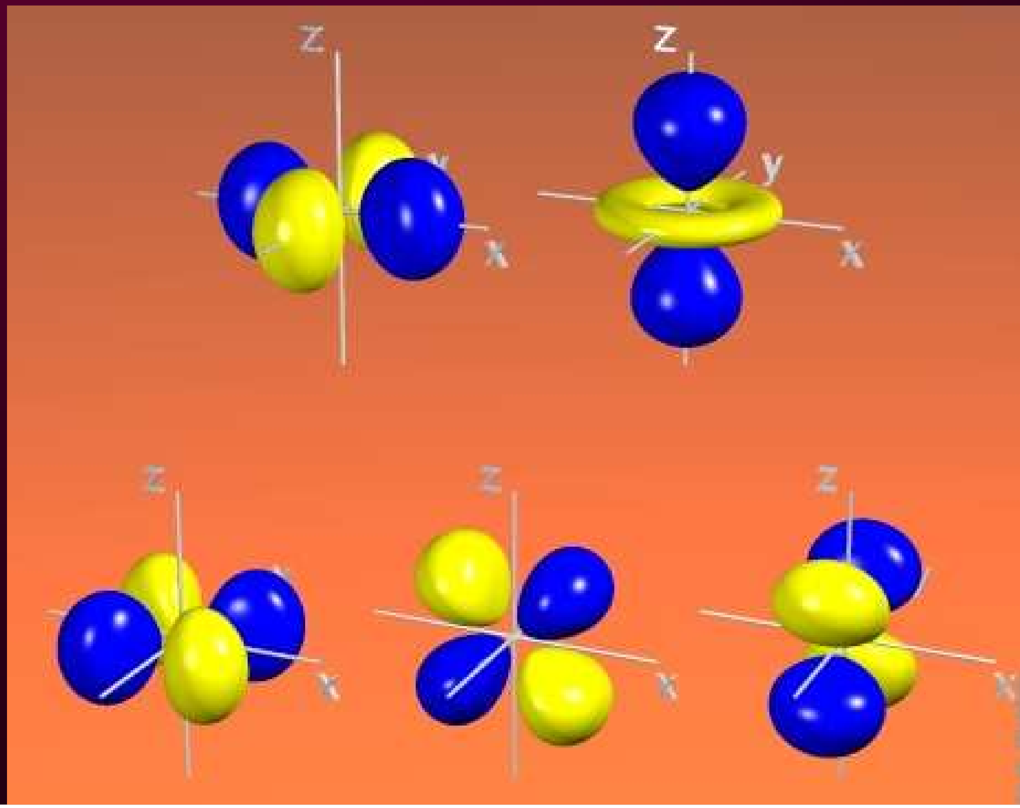
1 OA s ($m_\ell = 0$)



3 OA p ($m_\ell = \pm 1$; 0)



5 OA d ($m_\ell = \pm 2$; ±1 ; 0)



http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/

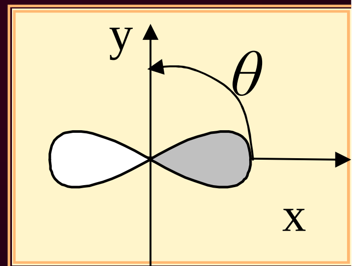
IV.4. Signes des OA

Ψ^2(x,y,z,t) = Le carré du module de la fonction d’onde (donc positif) représente la densité de probabilité de présence de l’électron dans l’OA et permet de représenter l’enveloppe des OA.

Ψ (x,y,z,t) = La fonction d’onde de l’OA (= une solution de l’équation de Schrödinger appliquée à l’électron) peut être positive ou négative. Ce changement de signe est représenté par un changement de couleur des lobes de l’enveloppe de l’OA.

Exemple : OA 2p

$$\psi_{2,1} = \frac{1}{8\sqrt{2\pi r_0^5}}.\cos(\theta).r.\exp\left(\frac{-r}{r_0}\right)$$



IV.5. Remplissage des OA

. ***Le nombre quantique de spin m_s*** : 4ème nombre quantique
(m_s = 1/2 ou -1/2)

. ***Principe d'exclusion de Pauli*** : dans un atome (ou une molécule), 2 électrons ne peuvent pas avoir les 4 mêmes nombres quantiques.

⇘ Cases quantiques

. ***Règle de Klechkowski*** :

L'énergie des OA croit avec (n+ℓ). La configuration la plus stable est celle de plus basse énergie. On l'obtient en suivant les 2 règles suivantes :

1. selon n+ℓ croissant
2. si n+ℓ identique, l'OA dont le n est le + petit sera remplie la première.

. ***Règle de Hund*** : pour un même énergie, les électrons occupent un maximum d'orbitales, leur spin étant parallèle.

Exemples : $_{7}N$; $_{26}Fe$

Chapitre 2

Le tableau périodique

D. Mendeleiev (1869)

Mise en évidence de la périodicité des propriétés des éléments connus

I. Structure de la classification périodique

I.1. Principe de construction

Règle de Klechkowski ; Principe de Pauli ; Règle de Hund

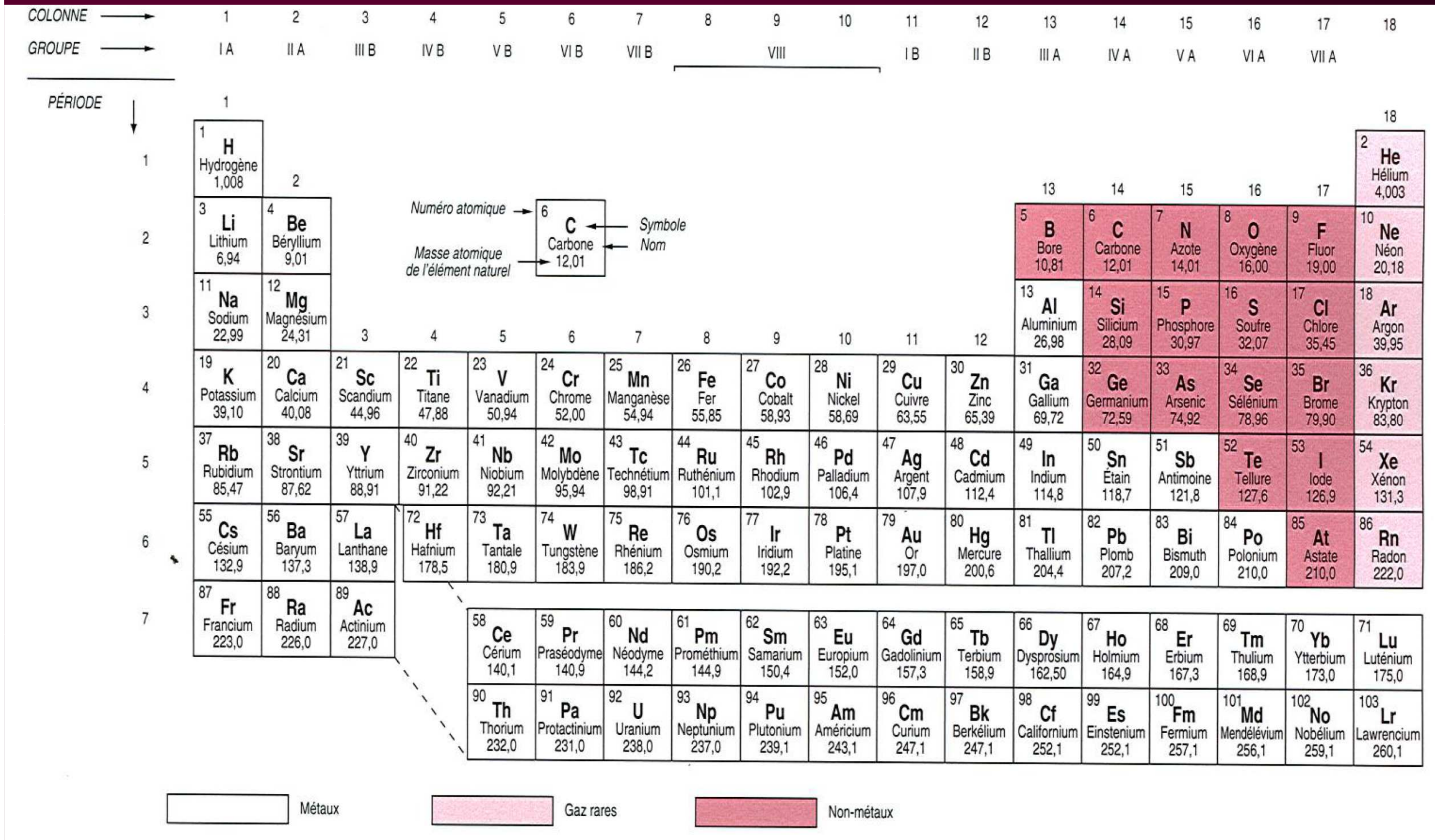


Figure 2-1 : Tableau de la classification périodique
(Cours de Chimie Physique, P. Arnaud, Dunod)

1. Classement par Z croissant
2. Les périodes sont classées de haut en bas par n croissant
3. Tous les éléments d'une même période ont même configuration des **électrons de cœur**
4. Tous les éléments d'une même colonne (rangée) ont même configuration des **électrons de valence**

↳ 7 périodes

18 rangées

I.2. Analyse

a. par bloc

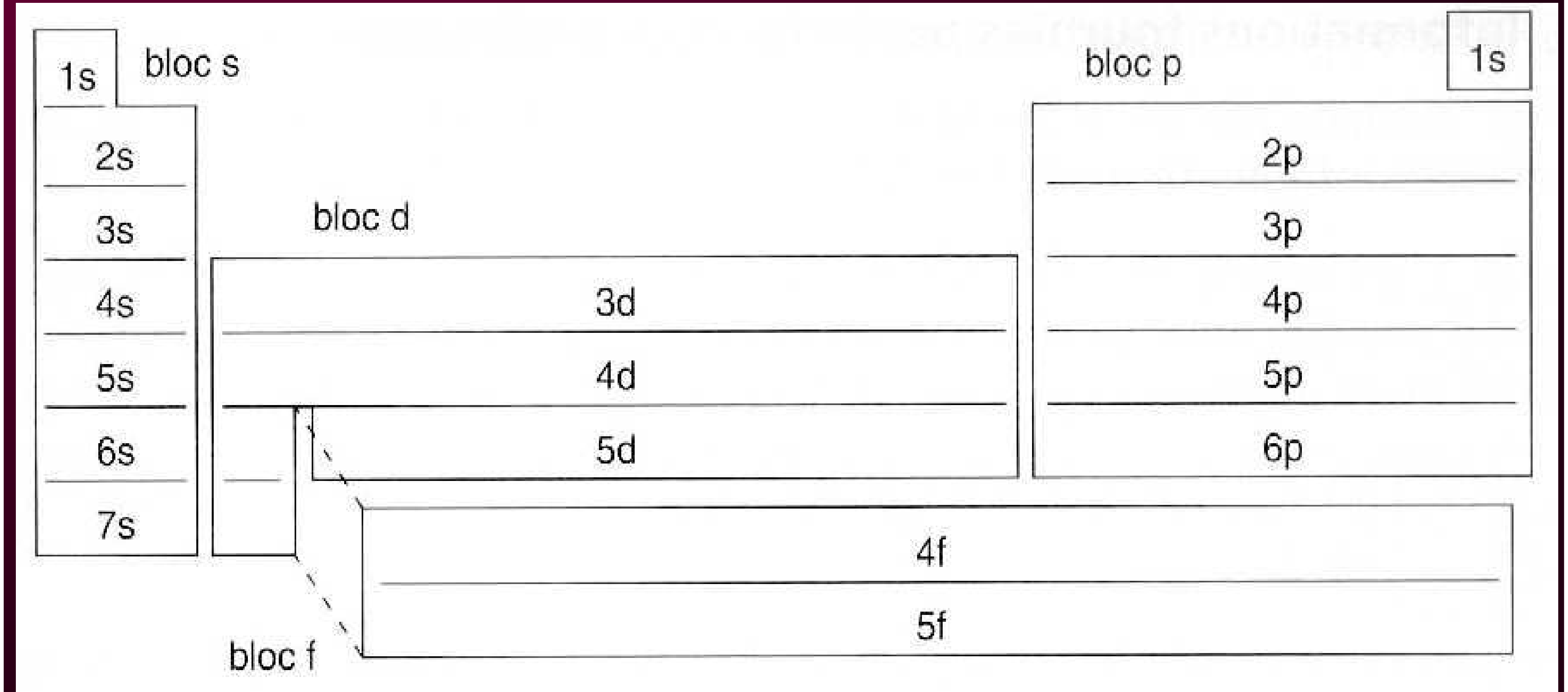


Figure 2-2 : Blocs s, p, d et f dans le tableau de la classification périodique
(Cours de Chimie Physique, P. Arnaud, Dunod)

. Lanthanides

. Actinides

. Eléments de transition

b. par famille

. Alcalins

. Alcalino-terreux

. Halogènes

. Gaz rares

I.3. Métaux / non-métaux

. Localisation

. Propriétés des métaux :

- thermodynamiques
- de conduction
- mécaniques
- magnétiques
- chimiques

II. Evolution périodique de quelques propriétés

II.1. Energie d'ionisation

Energie requise pour arracher un électron d'un atome ou d'un ion à l'état gazeux :

$$X(g) \rightarrow X^{+}(g) + e^{-}$$

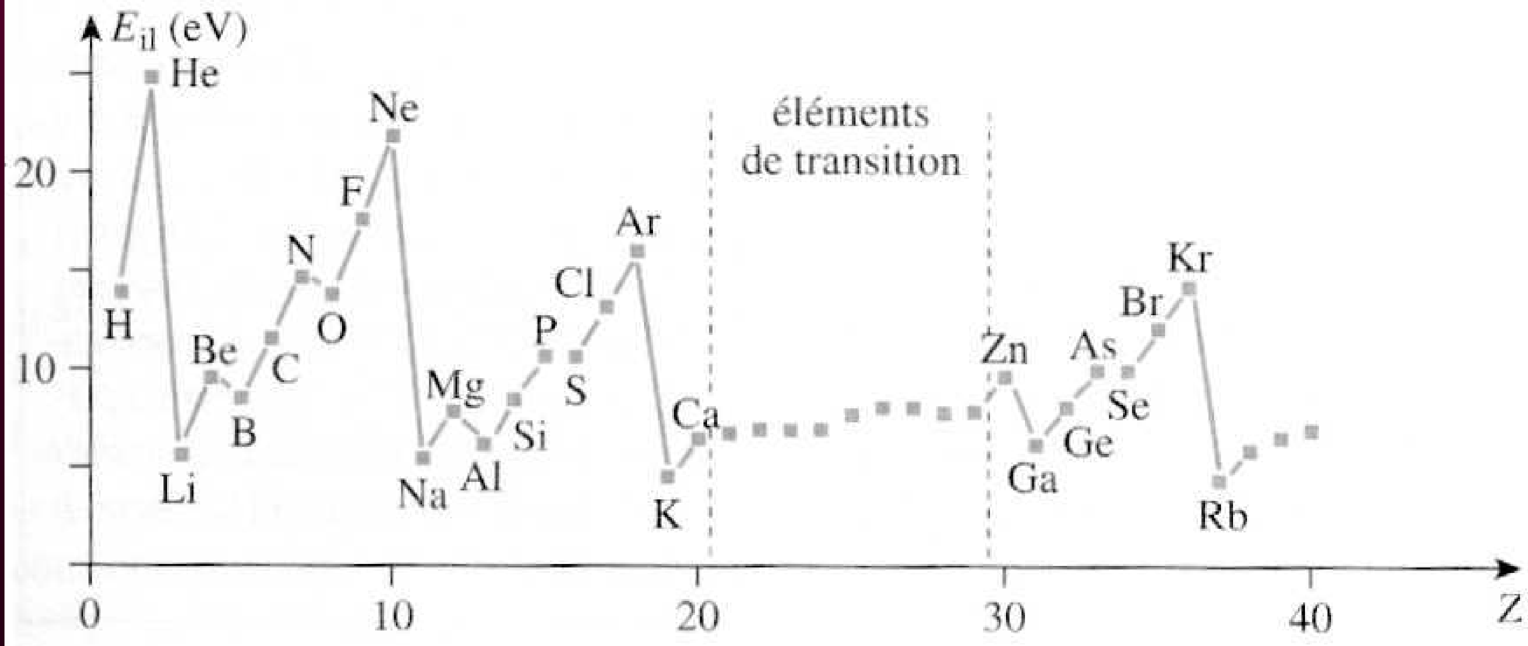


Figure 2-3 : Périodicité de l'énergie de première ionisation des éléments
(H-Prépa Chimie 1, A. Durupthy, Hachette)

Exemple d'énergies d'ionisation successives : Mg

II.2. L’électronégativité (χ)

Grandeur ***relative*** qui détermine l’aptitude d’un atome B à attirer à lui le doublet électronique qui l’associe à un autre atome

↳ Tendance à gagner des électrons ⇨ χ grand ⇨ propriété oxydante
Tendance à perdre des électrons ⇨ χ faible ⇨ propriété réductrice

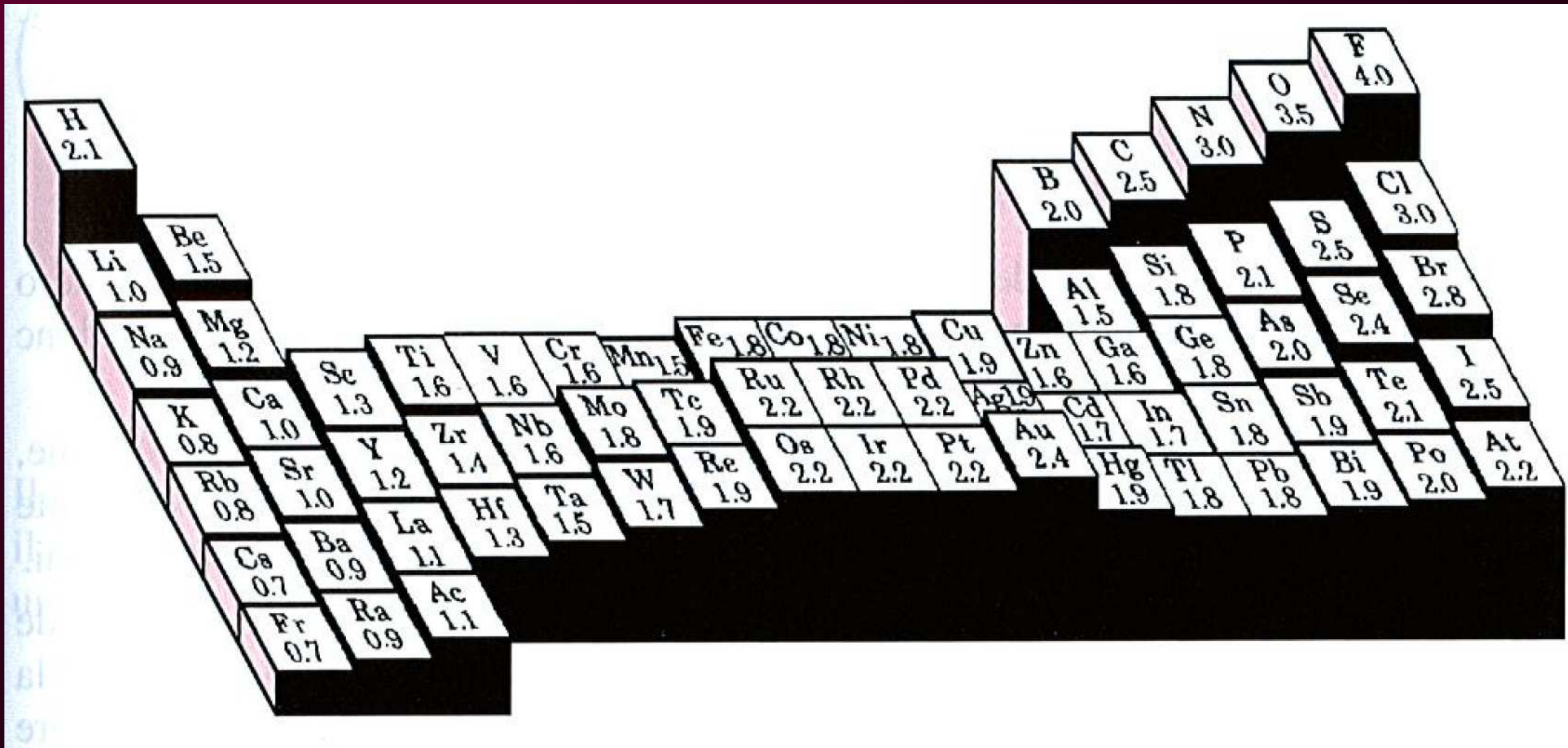


Figure 2-4 : Variations de l’électronégativité dans le tableau de Mendeleiev (échelle de Pauling)

(Cours de Chimie Physique, P. Arnaud, Dunod)

II.3. Le rayon atomique

Le rayon atomique représente le rayon des OA de valence

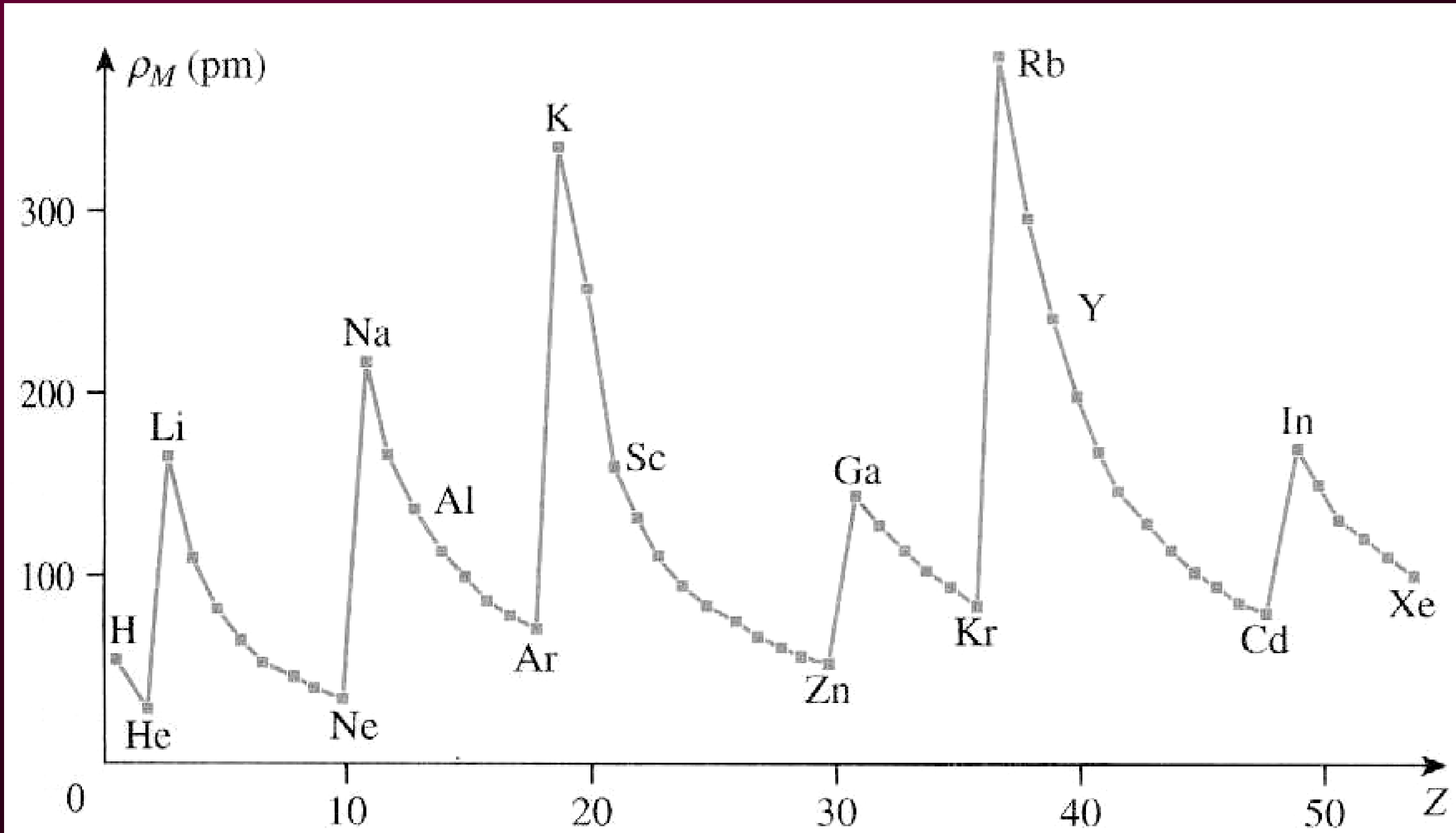
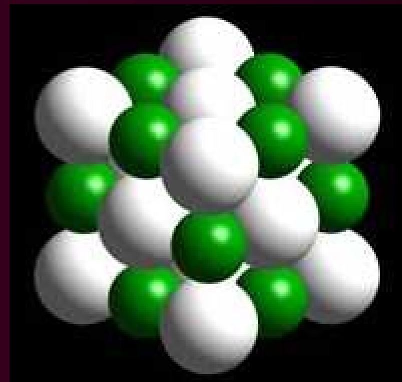


Figure 2-5 : Evolution du rayon ρ_M de l'OA de valence la plus externe de l'atome M
(H-Prépa Chimie 1, A. Durupthy, Hachette)

Chapitre 3


covalente / 2-3 atomes
La liaison chimique
ionique
1 atome
métallique
délocalisée
liaison faible ou
intermoléculaire

I. La liaison ionique



Liaison ionique

↕

Attraction d'un anion et d'un cation

↕

Forces électrostatiques

Exemples : les cristaux ioniques (NaCl)

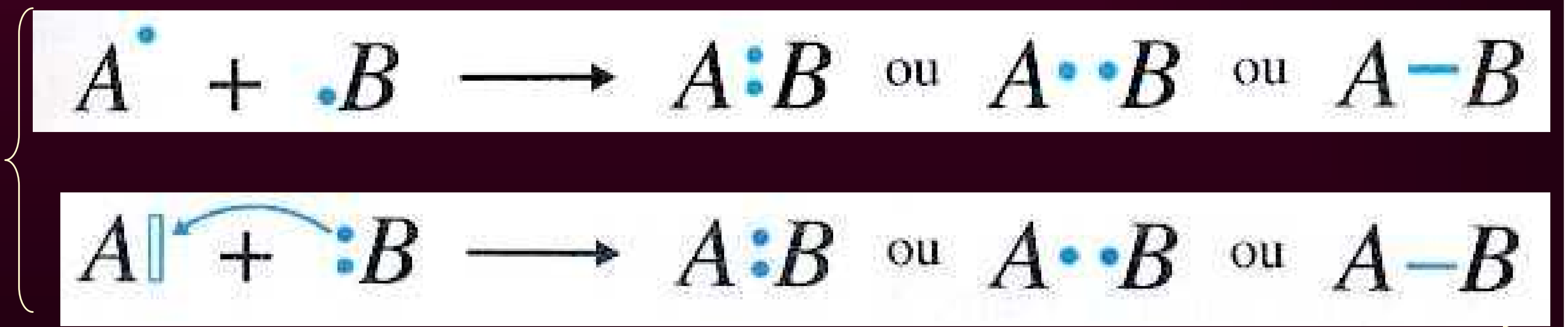
II. La liaison covalente

II.1. Le modèle de Lewis (1916)

Liaison covalente

↕

Mise en commun de 2 électrons de valence



Règle de l'Octet

Au sein d'une molécule, les atomes de la 2ème et 3ème période recherchent la configuration ns^2np^6 (gaz rares) et vont créer autant de doublets d'électrons qui leur sont nécessaires pour la réalisation de leur octet.

Remarque : H suit la règle du duet

Conséquence sur le nombre de liaisons le plus courant :

C = 4 ; N = 3 ; O = 2 ; F = 1

Méthode

1. Calcul du nombre d'électrons de valence
2. Choix de l'atome central
3. Liaison des autres atomes à l'atome central
4. Répartition des électrons restant (règle du duet et de l'octet)
5. Localisation des charges éventuelles

Exemples : H_2O ; CO_2 ; $(CH_3O)^-$

II.2. Géométrie des molécules : théorie VSEPR

Modèle de Gillespie

Toutes les paires liantes et non liantes se trouvent statistiquement à la même distance du noyau. Les électrons correspondants se repoussent mutuellement et se localisent dans des positions qui MINIMISENT LES REPULSIONS ELECTRONIQUES.

Formulation VSEPR

$$AX_mE_n$$

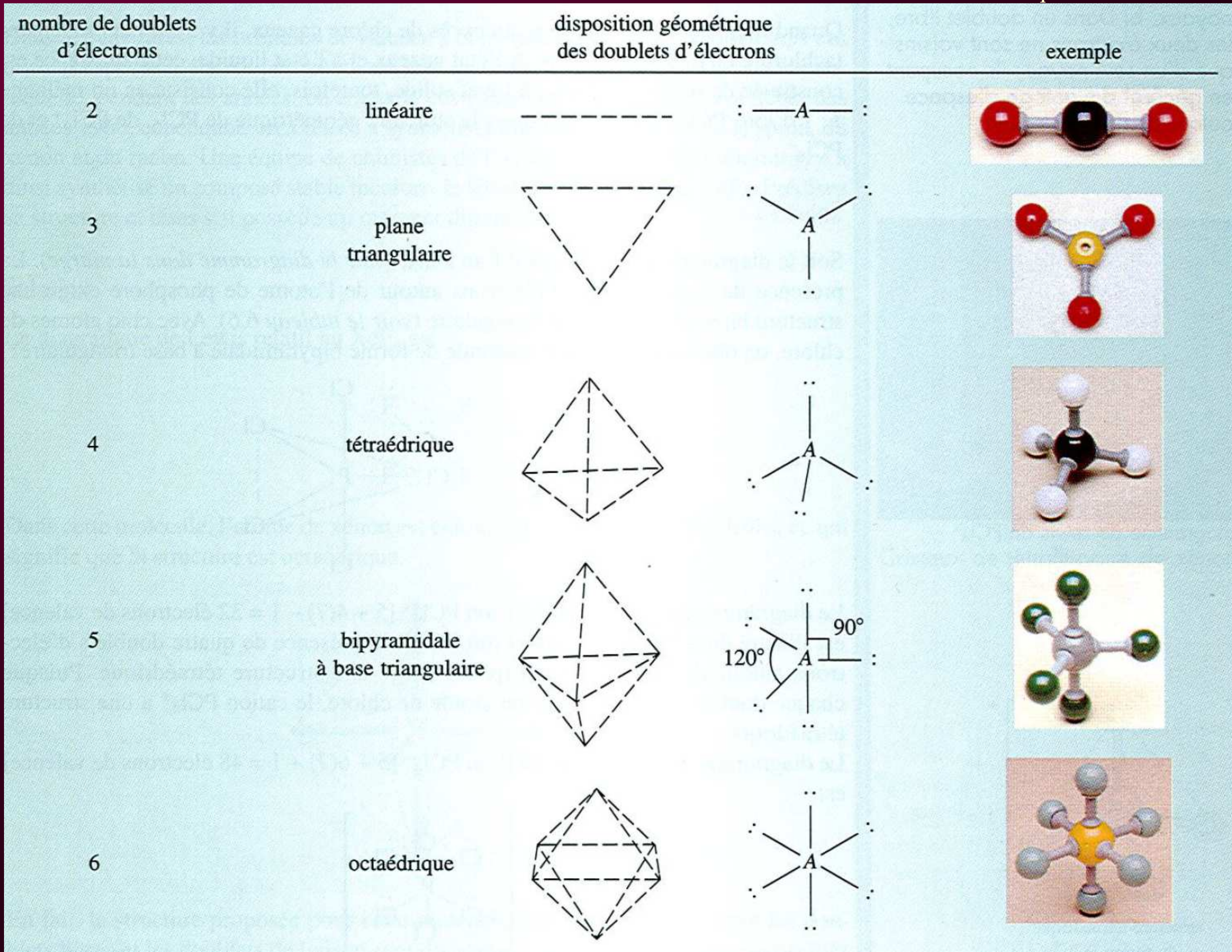


Figure 3-1 : Disposition des doublets d'électrons correspondant à la répulsion minimale

(Chimie Générale, S.S. Zumdhal & coll., De Boeck université)

m + n	*Formule structurale*	*Géométrie*	*Angle (deg)*	*Exemple*
2	AX_2E_0	linéaire	***180***	CO_2
3	AX_3E_0	triangulaire	***120***	CH_2O
	AX_2E_1	coudée		
4	AX_4E_0	tétraédrique	***109,28***	CH_4
	AX_3E_1	pyramide à base triangulaire		NH_3
	AX_2E_2	coudée		H_2O
5	AX_5E_0	bipyramide triangulaire	***120 et 90***	
	AX_4E_1	tétraèdre		
6	AX_6E_0	octaèdre	***90***	
	AX_4E_2	carrée		

Figure 3-2 : Caractéristiques structurales de quelques géométries AX_mE_n

Méthode

1. Etablir la structure de Lewis de la molécule
2. Définir m et n puis en déduire la géométrie

Exemples : les géométries du carbone

II.3. Modèle quantique : théorie des OM

Liaison covalente

↕

Recouvrement d'OA

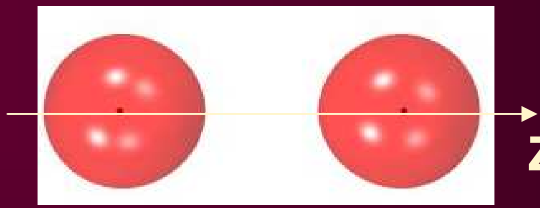
Construction des OM par combinaison linéaire d'OA

Conséquences :
- n OA → n OM
- 1 OM peut contenir 0, 1 ou 2 électrons
- $[\Psi(OM)]^2$: probabilité de présence de l'électron dans l'OM

a. Recouvrement axial des OA s : cas de H_2

2 OA 1s = 2 possibilités d'interaction

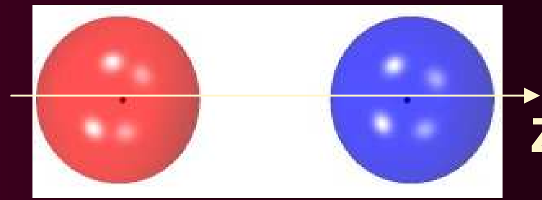
H_a H_b



$1s_a + 1s_b$

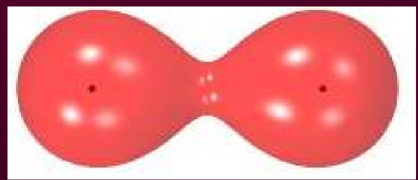
ou

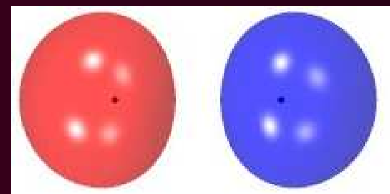
H_a H_b



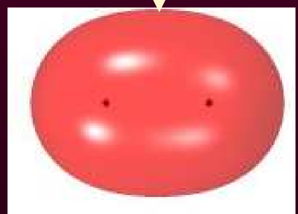
$1s_a – 1s_b$

Interaction lors du rapprochement

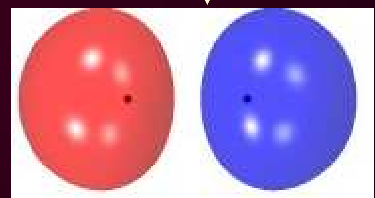




Molécule : $H_a–H_b$



OM liante σ_s



OM antiliante σ_s^*

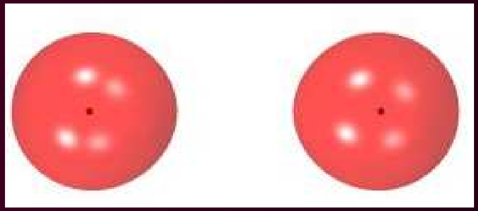
Figure 3-3 : Les OM σ_s
(http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/)

Le recouvrement S entre les 2 OA ψ_a et ψ_b est égal à :

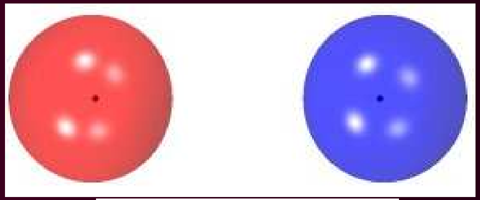
$$S = \psi_a \times \psi_b$$

3 cas possibles pour les OM :

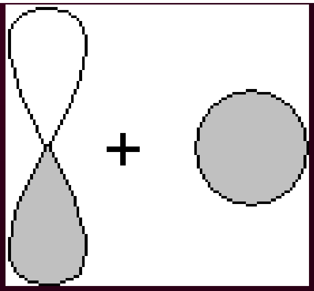
- S > 0 : orbitale liante



- S < 0 : orbitale antiliante



- S = 0 : orbitale non liante

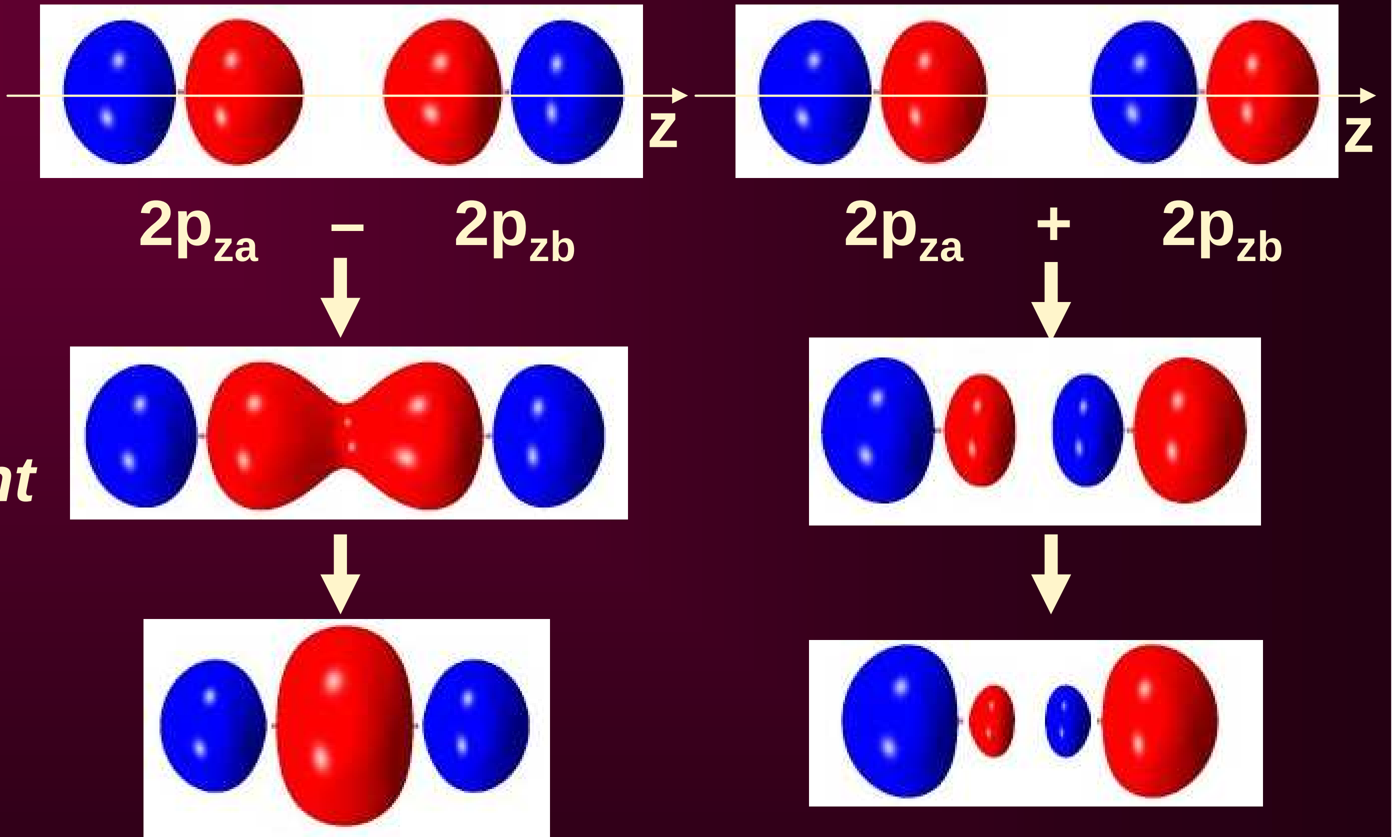


Propriétés :
- Axe des noyaux (axe (Oz)) = axe de symétrie : liaison σ
- L'OM liante représente la liaison chimique covalente

b. Recouvrement axial des OA p : σ_p ou σ_z

2 OA p_z = 2 possibilités d'interaction

Interaction lors du rapprochement



OM liante σ_p (S > 0)

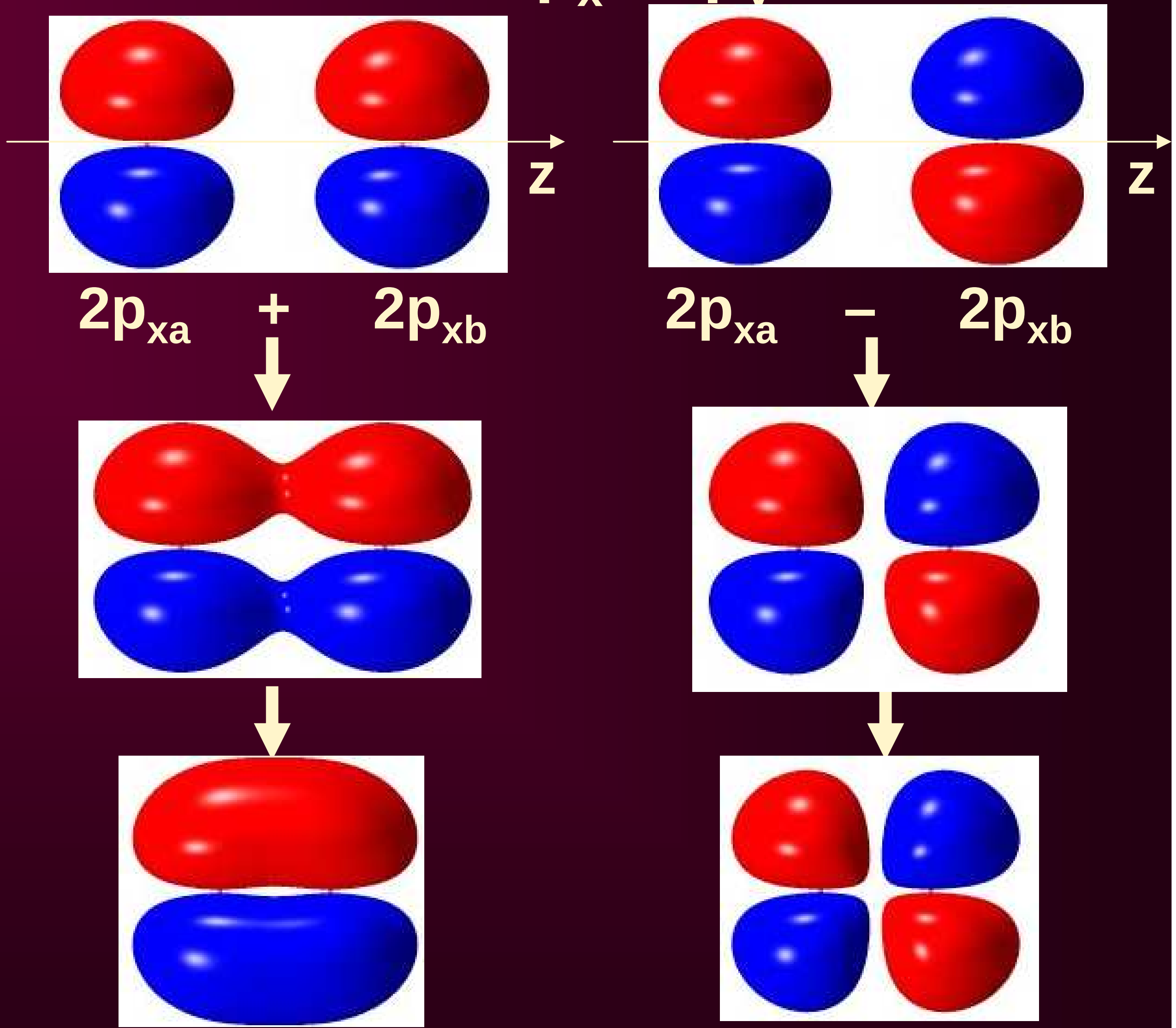
OM antiliante σ_p^* (S < 0)

Figure 3-4 : Recouvrement des OA p_z (OM σ_p)
(http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/)

c. Recouvrement latéral des OA p_x et p_y

2 OA p_x (ou p_y) = 2 possibilités d'interaction

Interaction lors du rapprochement



OM liante π_x ou π_y

OM antiliante π_x^* ou π_y^*

Figure 3-5 : Recouvrement des OA p_x et p_y (OM π)
(http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/)

Propriétés :

- Axe des noyaux (axe (Oz)) = axe d'antisymétrie : liaison π
- L'OM liante représente la liaison chimique covalente π
- L'interaction latérale est moins favorable que l'interaction axiale.

d. Diagramme énergétique des molécules

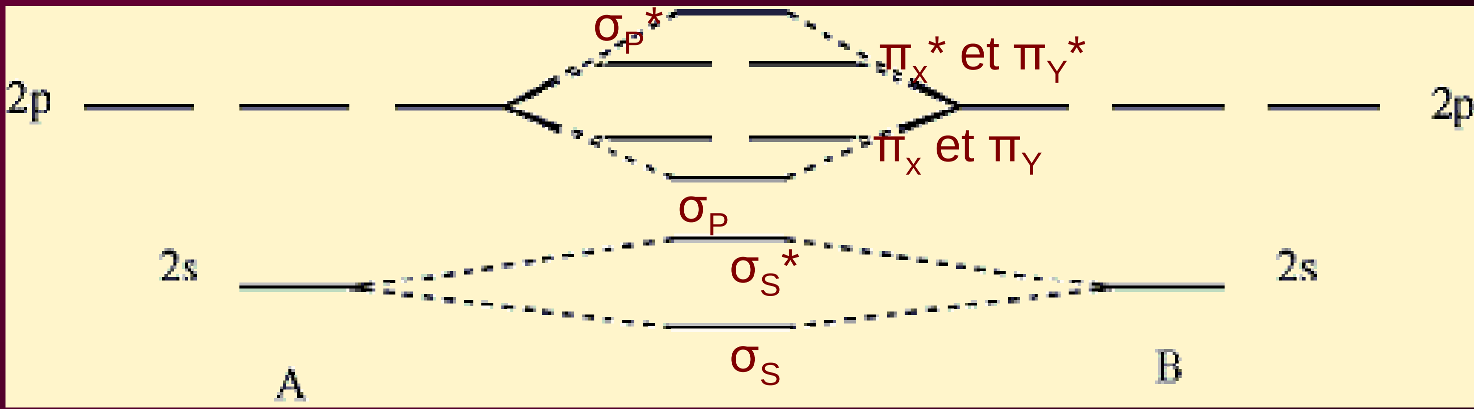


Figure 3-6 : Diagramme des niveaux d'énergie des OM d'une molécule AB de la seconde période

Méthode :
- Placer les OA de valence
- Faire interagir les OA proches en énergie et de recouvrement non nul
- Remplir les OM selon les 3 règles de remplissage

Propriétés :
- Pour B_2, C_2, N_2 : inversion des niveaux ($\pi_x\pi_y$) et (σ_p)
- Indice de liaison :

$$i = \frac{n_{e^-_{liant}} - n_{e^-_{antiliant}}}{2}$$

- Magnétisme

e. Cas des molécules hétéronucléaires

Dissymétrie des OM

Plus l'atome est électronégatif, plus les OA sont basses en énergie

↳ Le doublet n'est plus équitablement partagé

↳ Excès et défauts d'électrons

↳ Existence de charges partielles

Exemple : HF

Le moment dipolaire μ (en C.m) permet d'évaluer le pourcentage ionique δ ($0 \leq \delta \leq 1$) tel que :

$$\mu = \delta . e . l$$

III. La liaison métallique

Liaison métallique

⇕

Mise en commun
de tous les électrons de valence

Extension de la notion de valence :
gaz d'électrons de valence qui
baignent les cations métalliques
(noyaux + électrons de cœur)

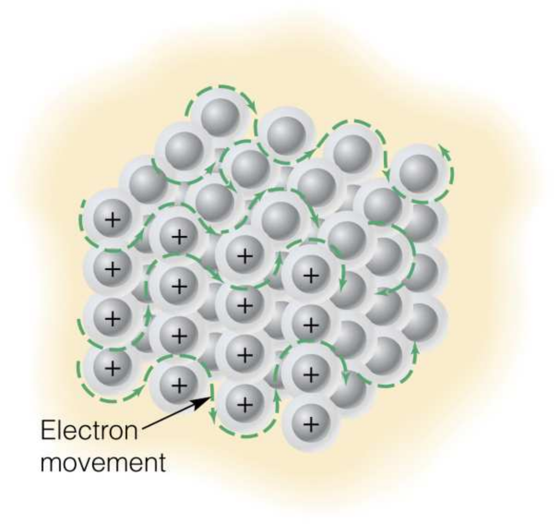


Figure 3-6 : Schéma de la liaison métallique
(http://wps.prenhall.com/wps/media/objects)

Somme des OA sur tous les atomes du métal

Structure de **Bandes** :
- Electrons de valence complètent les niveaux en suivant les 3 règles de remplissage
- Densité d'états (DOS) en fonction de E

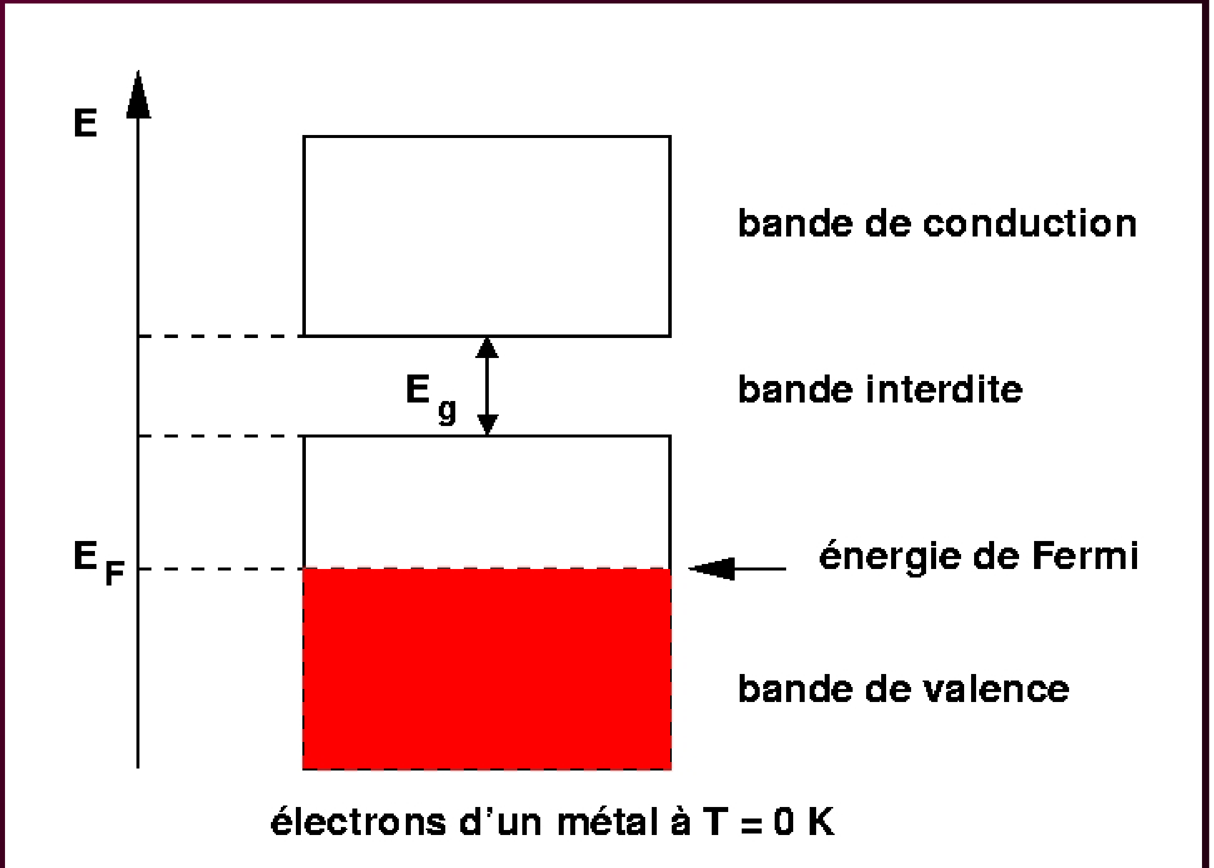


Figure 3-7 : Structure de bande
(cours PDM2 Y. Zolnierowski)

↳
- forte cohésion
- plasticité
- conductivité

Cours de PDM2 au semestre 2

IV. Les liaisons faibles intermoléculaires

IV.1. Les liaisons Hydrogène

La liaison Hydrogène, notée A–H•••B, résulte d'une interaction entre un atome d'hydrogène lié à un atome électronégatif (A ≡ N, O, F) et un atome électronégatif B porteur d'un doublet libre (B ≡ N, O, halogènes,…).

↳

- dimérisation
- discontinuités dans l'évolution des propriétés physiques

IV.2. Les liaisons de Van der Waals

Ces liaisons proviennent des forces d'interactions électrostatiques dipôle – dipôle. Elles assurent la cohésion des solides et liquides moléculaires.

V. CONCLUSION

	Liaisons	*Structure électronique*	*Énergie*
fortes	ioniques	localisée sur chaque atome	entre 100 et 1000 kJ.mol^{-1}
	covalentes	partagée entre 2/3 atomes	
	métalliques	délocalisée (gaz d'électrons)	
faibles	H		10-100 kJ.mol^{-1}
	VdW		1-20 kJ.mol^{-1}

Figure 3-8 : Les liaisons chimiques (structure électronique et énergie)

Chapitre 4

Nomenclature et géométrie des composés organiques

Rappel : Les géométries du carbone

I. Fonctions en chimie organique

Valence d'une fonction

Monovalentes

- Dérivé halogéné
- Alcool
- Amine

Divalentes

- Aldéhyde
- Cétone

Trivalentes

- Acide carboxylique
- Ester
- Amide
- Nitrile

Chaîne carbonée

- Alcane
- Alkyle
- Alcène
- Alcyne
- Cycle

I.1. Chaîne carbonée

a. Les alcanes (squelettes saturés)

Formule générale : C_nH_{2n+2}

$n(C_nH_{2n+2})$	n-alcane
1	Méthane
2	Éthane
3	Propane
4	Butane
5	Pentane
6	Hexane
7	Heptane
8	Octane
9	Nonane
10	Décane

Figure 4-1 : nomenclature des alcanes et nombre d'atomes de carbone

Groupements –R : **ALKYLE**

Figure 4-2 : Groupements alkyle

Méthyle	$–CH_3$ ou –Me
Éthyle	$–CH_2–CH_3$ ou –Et
Propyle	$–CH_2–CH_2–CH_3$ ou –Pr
Butyle	$–CH_2–CH_2–CH_2–CH_3$ ou –Bu

b. Les squelettes insaturés

- Les alcènes

Formule générale : $\mathbf{C_nH_{2n}}$

suffixe : -**ène**

Exemples

- Les alcynes

Formule générale : $\mathbf{C_nH_{2n-2}}$

suffixe : -**yne**

Exemple : éthyne

Remarque : la(les) liaison(s) π bloque(nt) la rotation

c. Cycle saturé ou cyclane

préfixe : **cyclo-**

Exemple : cyclohexane

d. Cycle insaturé ou arène

2n+1 doubles liaisons ⇨ série **aromatique**

Exemple : benzène

I.2. Valence d'une fonction (cf. Figure 4-3)

Valence d'une fonction : nombre d'atomes d'hydrogène substitués sur le carbone fonctionnel par les hétéroatomes (atomes différents de C ou H).

I.3. Fonctions monovalentes

. Fonction halogéné préfixe : **chloro-**

Exemple : 1-chloropropane

. Fonction alcool suffixe : **-ol**

Exemple : 2-méthylbutan-2-ol

. Fonction amine suffixe : **-amine**

Exemple : éthanamine

I.4. Fonctions divalentes

. Fonction aldéhyde suffixe : **-al**

Exemple : éthanal

. Fonction cétone suffixe : **-one**

Exemple : propanone / pentan-2-one

I.5. Fonctions trivalentes

. Fonction acide carboxylique suffixe :**acide + -oïque**

Exemple : acide éthanoïque

. Fonction ester suffixe : **-oate + -yle**

Exemple : butanoate d'éthyle

. Fonction amide suffixe : **N- + -yle + -amide**

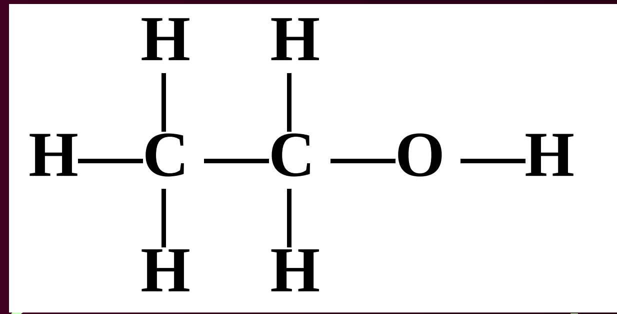
Exemple : N-méthyl-propanamide

. Fonction nitrile suffixe : **-nitrile**

Exemple : butanenitrile

II. Écriture des molécules organiques

II.1. Formule développée

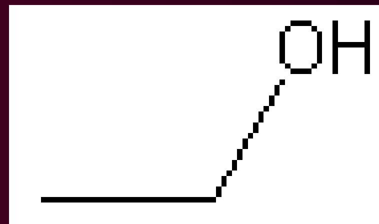


II.2. Formule semi-développée ou compacte

CH_3 —CH_2 —OH

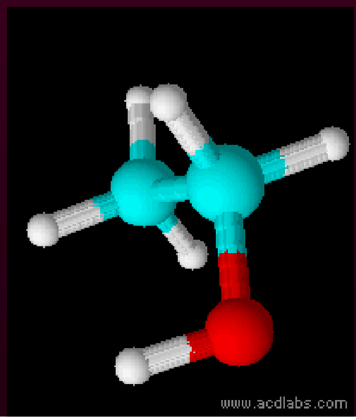
CH_3 CH_2 OH

II.3. Formule topologique

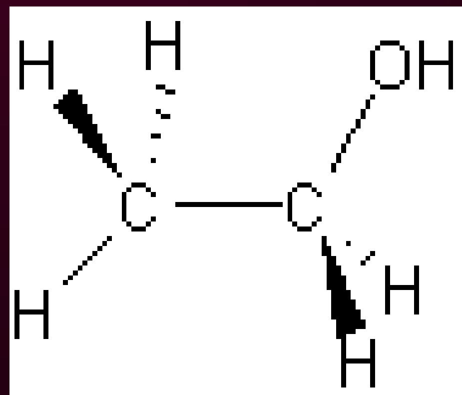


II.4. Formule tridimensionnelle de Cram

Ethanol-3D



⇨



III. Isomères

. *Isomères* : composés ayant même formule moléculaire mais qui diffèrent par l'agencement des atomes dans la molécule.

III.1. Isomères de conformation

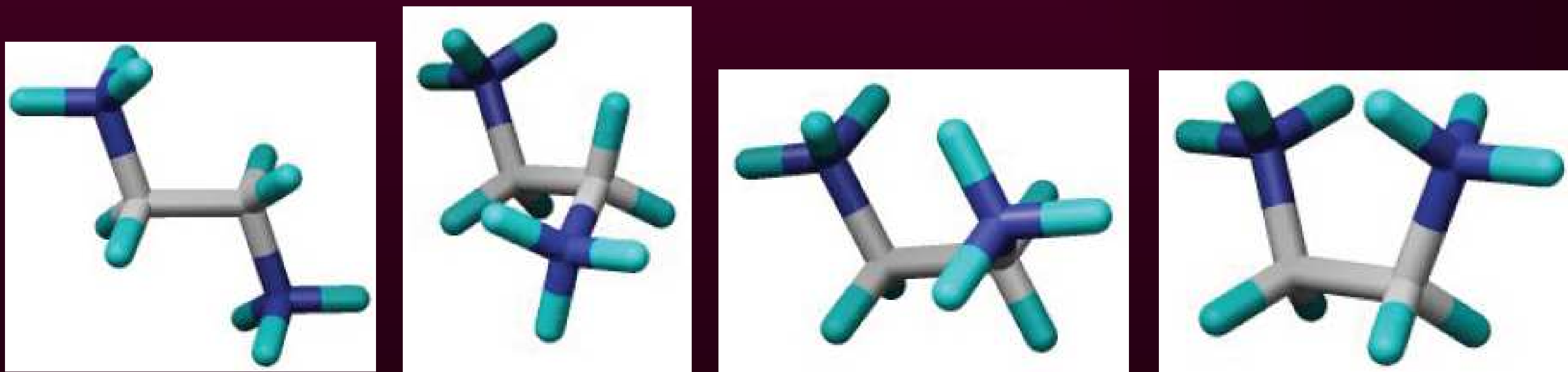
Libre rotation de la liaison C–C

↕

Isomères de conformation

Exemple : butane

Figure 4-3 : Isomères de conformation du butane
(http://cook.chem.ndsu.nodak.edu/chem341/chem341_06/files/conformation-lecture.pdf)



180° 120° 60° 0°

III.2. Isomères de constitution

. Isomères de chaîne *Exemple : C_4H_{10}*

. Isomères de position *Exemple : C_3H_7Cl*

. Isomères de fonction *Exemple : C_3H_6O*

III.3. Stéréo-isomères de configuration

a. Définition

Une même formule développés plane peut correspondre à plusieurs isomères stériques ou stéréo-isomères différant par la disposition spatiale de leurs atomes, donc non superposables

Enantiomères : stéréo-isomères dont les configurations sont images l'une de l'autre dans un miroir plan (mêmes propriétés physico-chimiques)

Diastéréo-isomères : stéréo-isomères dont les configurations ne sont pas images l'une de l'autre dans un miroir plan (propriétés physico-chimiques différentes)

Exemples : mains / alanine (ou acide 2-aminopropanoïque)

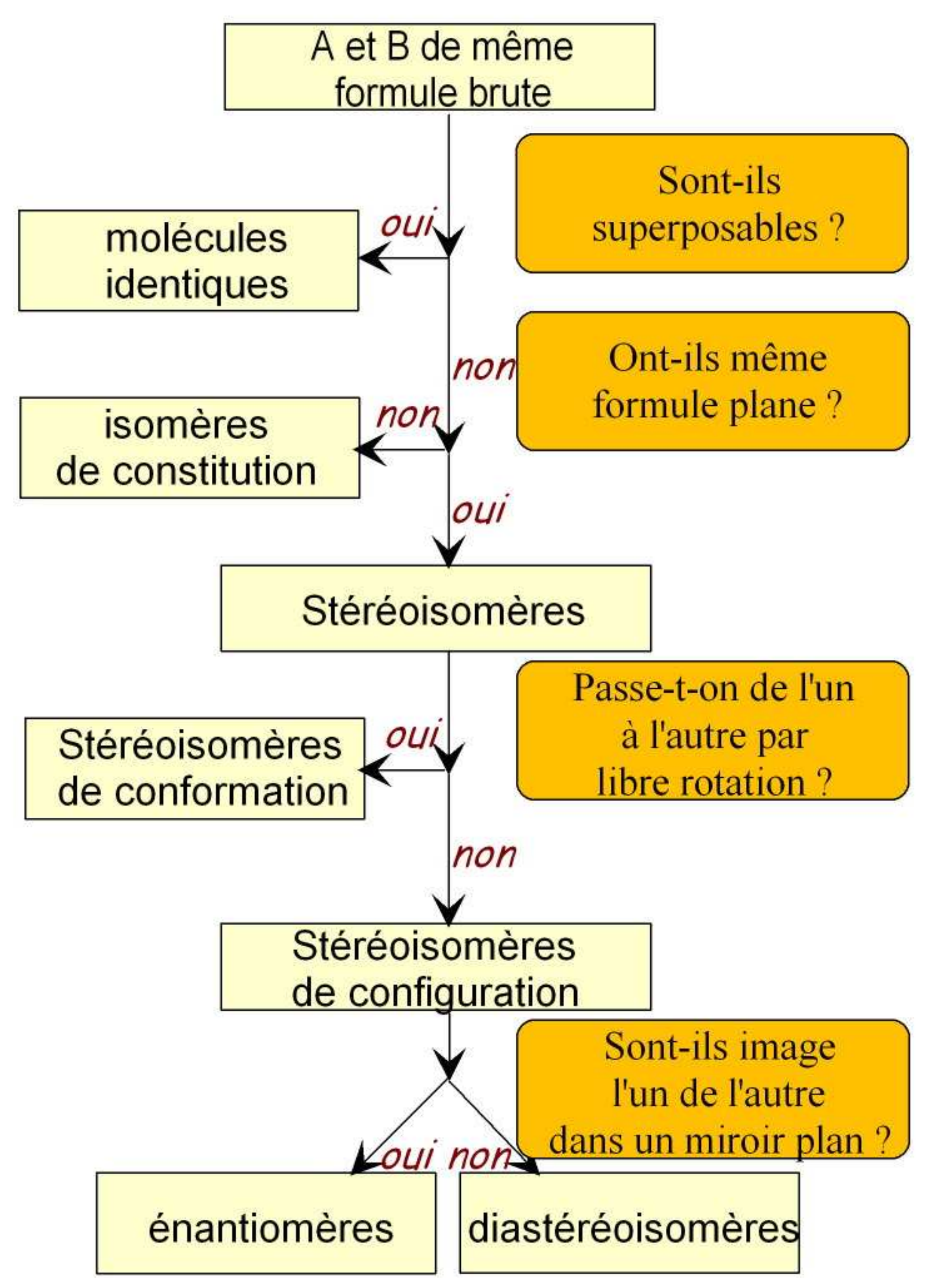
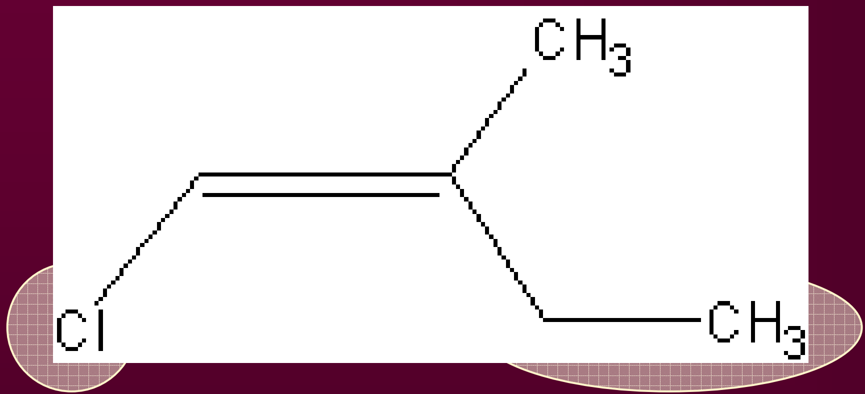
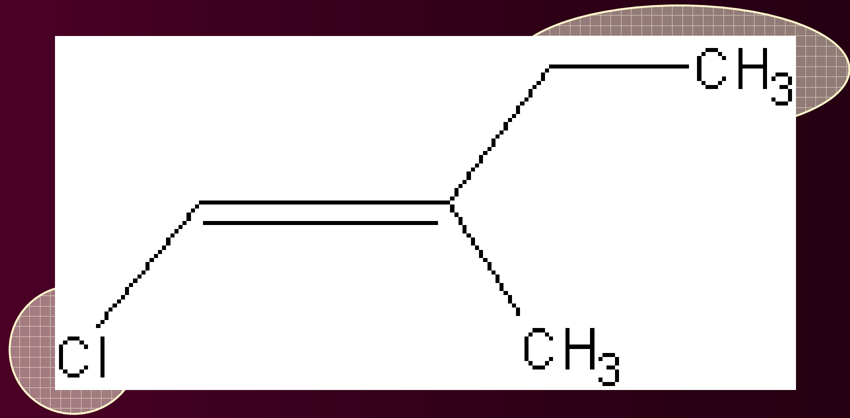


Figure 4-4 : Récapitulatif

b. Diastéréo-isomérie Z/E



Groupements prioritaires
du même coté : **Z**



Groupements prioritaires
des deux cotés opposés : **E**

Règles de priorité C.I.P. :

1. Le groupement dont l'atome lié au carbone a le plus grand numéro atomique est prioritaire
2. En cas d'égalité, on compare les atomes du rang suivant sur chaque substituant.
3. 1 liaison multiple = plusieurs liaisons simples

c. Cas du carbone asymétrique

Certaines substances, dites « optiquement actives », possèdent la propriété de faire tourner d'un angle α la direction de vibration (cf. la polarisation : cours + TP optique ondulatoire (2ème année))

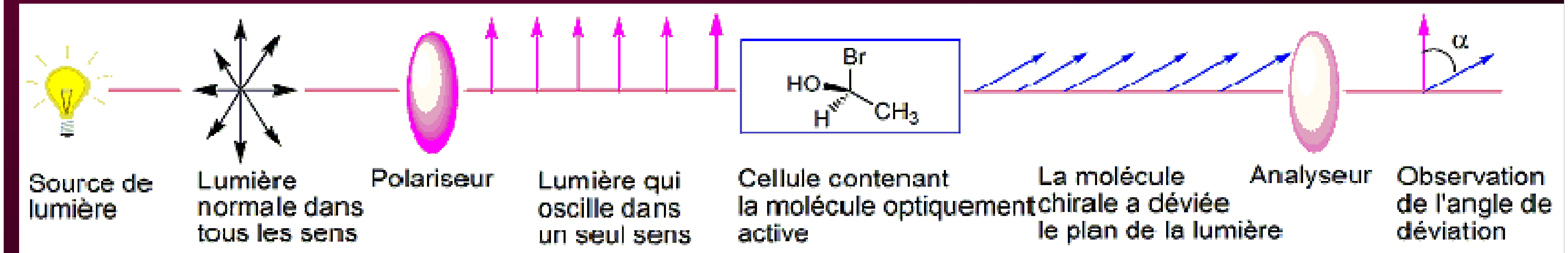


Figure 4-5 : Mesure du pouvoir rotatoire
(http://pagesperso-orange.fr/patrick.kohl/spectro_oem/spectro_oem_7.htm)

. Loi de Biot : $\alpha = [\alpha_0] . l . C$

. Substance dextrogyre : α < 0
. Substance levogyre : α > 0

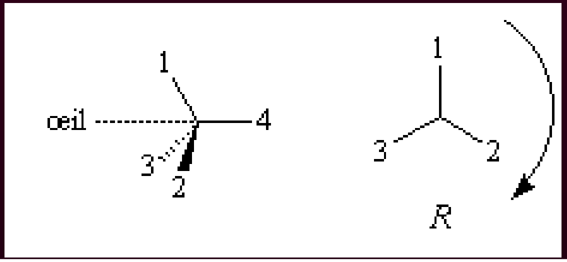
<u>Un carbone asymétrique</u> (noté C*) est un carbone tétraédrique possédant 4 substituants différents.
Une structure possédant un atome asymétrique est dite **<u>chirale</u>**.

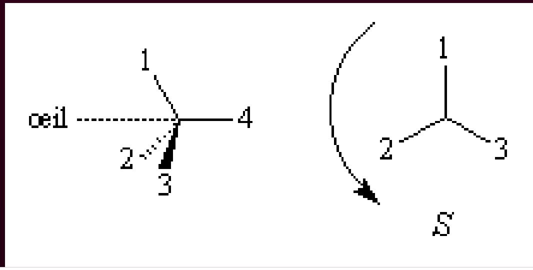
Exemple : alanine

<u>Nomenclature R/S</u> (ou configuration absolue) :

- Classer les substituants du C* selon les règles C.I.P. : 1>2>3>4
- **<u>Regarder dans l'axe C*→4</u>** et tourner dans l'ordre croissant des 3 autres substituants
- L'énantiomère R (rectus) correspond au sens de rotation indirecte (sens horaire), l'énantiomère S (sinister) est associé au sens de rotation directe

Figure 4-6 : Configurations absolues (http://www.faidherbe.org/site/cours/dupuis/regcip.htm)





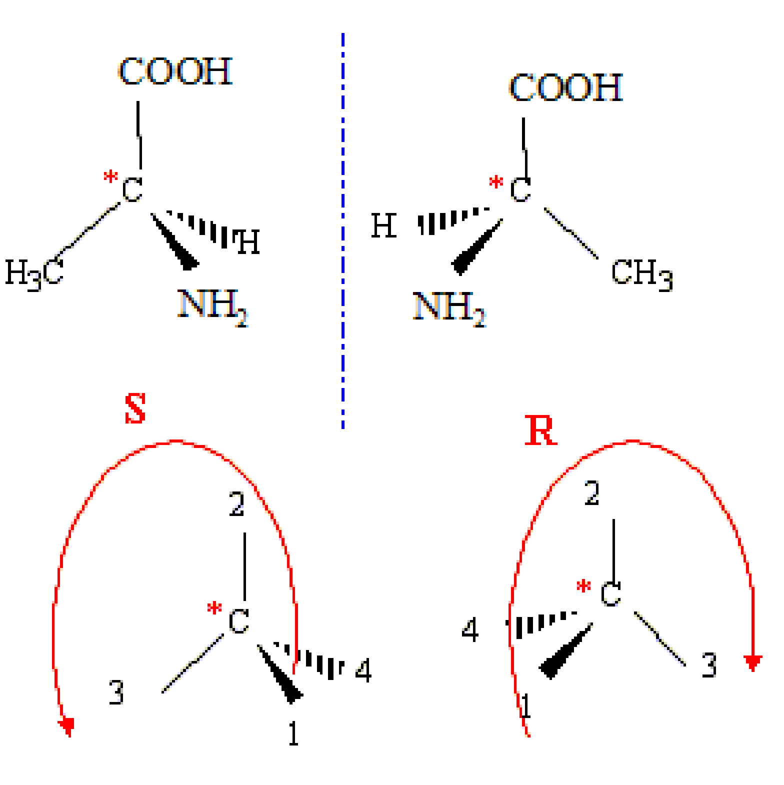


Figure 4-7 : Configurations absolues de l'alanine (http://www.chimix.com/an6/sup/capes23.htm)

Remarques :

- un mélange équimolaire des 2 énantiomères est un mélange **racémique** (neutralisation de ses propriétés optiques)
- Dans le cas de nC*, 2^n stéréo-isomères sont obtenus

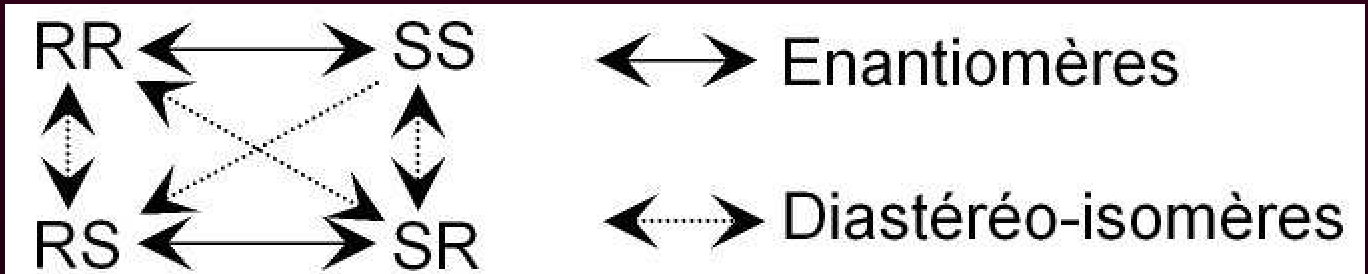


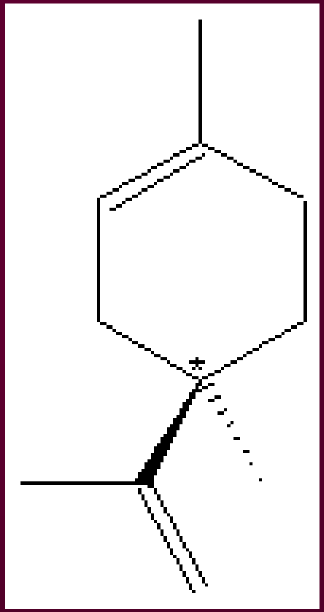
Figure 4-8 : Cas de 2C*

Conclusion

Conformation	***Configuration***
2 structures de même configuration mais de conformations différentes sont détectables mais non séparables.	2 structures de configurations différentes sont séparables
Pour passer d'une conformation à une autre, il suffit de rotations autour de liaisons simples (5-50 $kJ.mol^{-1}$)	Pour passer d'une configuration à une autre, il faut rompre des liaisons (250-400 $kJ.mol^{-1}$)

Figure 4-9 : Bilan

. Goût et odeur



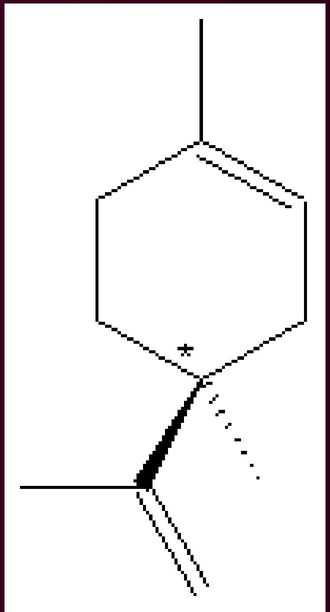


Figure 4-10 : a. (S)-limonène (odeur de citron) ; b. (R)-limonène (odeur d'orange)

. Pharmacologie

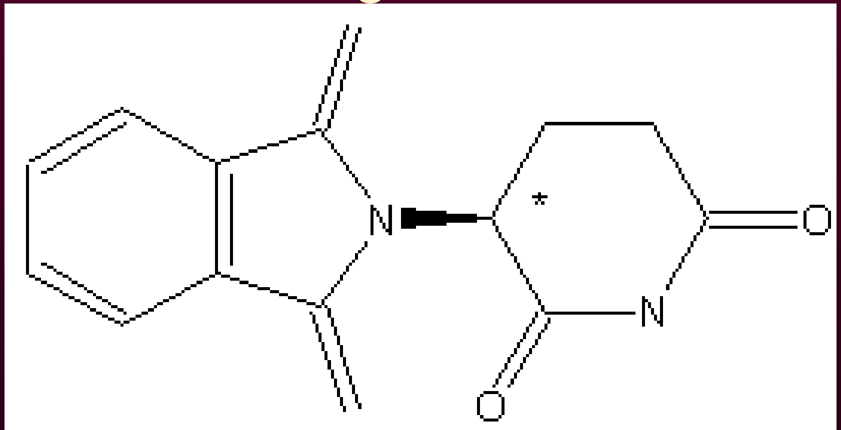
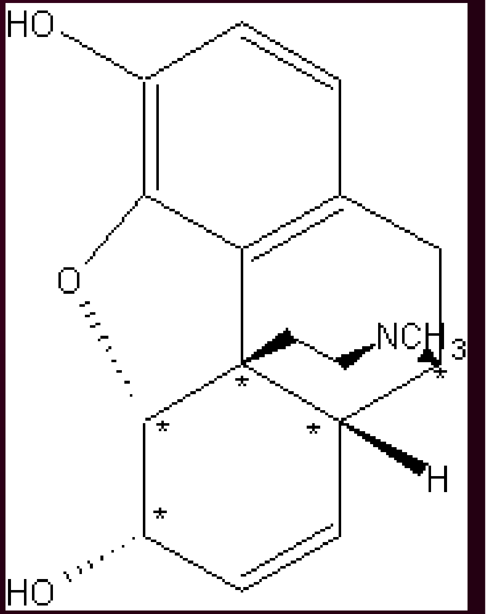


Figure 4-11 : (S)-thalidomide (malformation du fœtus) ;
(R)-thalidomide : tranquillisant non toxique

Figure 4-12 : Morphine



. Catalyse et chimie fine